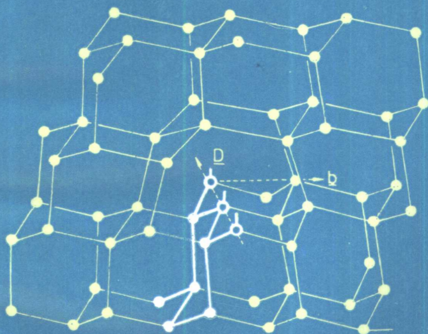
晶体缺陷

陈继勤 陈敏熊 赵敬世 编著



浙江大学出版社

晶 体 缺 陷

陈继勤　陈敏熊　赵敬世　编著

浙江大学出版社

（浙）新登字第10号

内 容 简 介

本文主要介绍位错的基本理论及其在材料中的实际应用。全书共分七章，分别阐述点缺陷和线缺陷的基本性质、典型晶体中的位错、面缺陷的基本性质、缺陷间相互作用、位错理论在金属强度中的应用和晶体缺陷对物理性能的影响。本书文字叙述详尽易懂，每一章附有思考题与习题，另附参考文献，便于自学和深入学习有关内容。

本书可作为金属材料与热处理专业以及热加工类专业研究生教材，也可供相应专业的大专院校师生和有关工程技术人员参考。

晶 体 缺 陷
陈继勤 陈敏熊 赵敬世 编著
责任编辑 涂 红
*
浙江大学出版社出版
浙江大学印刷厂印刷
浙江省新华书店发行
*
开本：850×1168 1/32 印张：9.9375 字数：249千字
1992年4月第1版 1992年4月第1次印刷
印数：0001-2000
ISBN 7-308-00947-5
TG·009 定价：3.30元

编者的话

本书是根据金属材料与热处理专业硕士研究生培养工作研究会第二届会议要求出版硕士生晶体缺陷课程用参考教材的决定而编写的。编写大纲主要是依据1986年11月杭州晶体缺陷教学研讨会制定的教学大纲确定的。

晶体缺陷理论已广泛应用于材料科学的各个领域，故本书以介绍有关基本理论和基础知识为主（第一至第五章），适当介绍实际应用（第六至第七章）。在编写时注意了与本科生金属学、力学性能等课程的衔接，以及研究生其它课程的横向联系。此外，尽可能避免简单重复，力求做到在原有基础上的深入。有关位错观测的内容在本科生和研究生某些课程（如x射线金属学，金属电子显微分析）中要作详细介绍，因而本书不单独设章。

考虑到各个院校所开设研究生课程以及学时数的不同，在使用本教材时可对有关内容（尤其是第七章）按实际情况适当增减或调整。

参加本书编写的有：天津大学陈敏熊（第一、三、四章），北京航空航天大学赵敬世(第二章)，浙江大学陈继勤（第五、六七章）。全文由陈继勤主编。北京科技大学余永宁，河北工学院王健安，上海工业大学周自强对全书进行了审阅，並提出了宝贵意见，在此表示衷心的感谢。

由于编者学识水平有限，书中缺点和错误在所难免，诚恳地希望读者批评指正。

编者

1991年8月

目　录

第一章　点缺陷基本性质

点缺陷是晶体中原子大小的零维缺陷，它在晶体中可以呈热平衡状态存在，而其它缺陷如位错和晶界是热力学不稳定的。点缺陷最早是1926年弗蓝克尔（Frankel）为了解释离子晶体导电的实验事实提出的。1942年塞兹（Seitg）等为了阐明扩散机制，研究了金属中点缺陷的一些基本性质。50到60年代，由于原子反应堆技术的进展，高能粒子对固体的辐照效应引起了人们的重视，又推动了对晶体中点缺陷的深入研究。70年代因点缺陷及其与位错的交互作用对半导体的性能有很大的影响，引起了人们对半导体材料中点缺陷性质的注意，并采用核磁共振等近代物理实验技术对点缺陷周围的状态（特别是电子结构和状态）进行了深入的研究。

由上述点缺陷研究的发展过程不难看出点缺陷是一种重要的缺陷，因为它影响许多晶体材料的物理性能和力学性能，如金属中的空位在原子运动或扩散相变过程中（诸如回火、沉淀、受损伤晶体的退火等）起着重要作用。

本章将着重介绍点缺陷的一些基本性质如点缺陷的种类、形成能、振动熵和点缺陷的迁移。而关于点缺陷对性能的具体影响将在本书第七章等有关章节中讨论。

§1　点缺陷种类

晶体中的点缺陷包括空位、间隙原子、杂质或溶质原子和色心、以及由它们组合而成的复杂缺陷（如空位对和空位群）。在纯金属中，只有空位和间隙原子。在离子晶体中会产生荷电的空

位和间隙原子。产生空位和间隙原子的途径可能有以下几种：

① 热振动　依靠热振动使原子脱离正常点阵位置而产生缺陷，如形成空位、间隙原子和空位对。这种缺陷受热振动的控制，它的浓度与温度有关，在平衡状态时称为热平衡态点缺陷。随着温度升高，热平衡态点缺陷的浓度也增高。如将晶体加热到高温，形成较高的空位浓度，然后由高温快速冷却，使空位在冷却过程中来不及消失，就得到含有过剩空位的晶体，从而形成非平衡态空位。用这样的方法得到的过饱和空位称为淬火空位。

② 冷加工　金属在塑性变形时要产生大量位错，位错间有交互作用，在适当条件下，位错交互作用的结果能产生点缺陷。由于塑性变形是在低的温度下进行的，所产生的点缺陷不会消失，而过饱和地保存下来。

③ 辐照　动能很大的高能粒子（如中子、α粒子、高速电子等）轰击金属晶体时，由于粒子轰击，原子离开原来位置，产生空位和间隙原子。如果高能粒子的动能很大，使最初被碰撞的原子获得比较高的能量，它有可能继续对其它原子发生碰撞，而形成大量的空位和间隙原子。

此外还有其它方法可以产生点缺陷。

间隙原子除了在极低温度高能粒子辐照的特殊条件下产生外，一般在纯金属中很少存在；相反，空位的存在却比较普遍，对金属晶体的影响也较大，所以空位在点缺陷中占有重要的地位，因此将着重讨论空位。

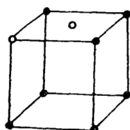
一、空位

在晶体点阵中，从原来应有原子存在的一个阵点取走原子，则在晶体中形成一个空位。这种空位称为肖脱基（Schottky）空位。经典的空位图像是很简单的，认为原子被取走后，周围原子只向空位处作稍微移动，产生松驰，留下一个明确的空位图像。

另外一种图像则认为空位形成后，其周围的原子向空位作较大的位移，而形成约有十几个原子大小的非晶区，类似于局部熔化，有人称之为松驰群。这两种图像很难通过实验直接观察来区别。一般情况可以认为是呈经典图像的，而在接近熔点时，可能呈现松驰群。

根据经典图像可以看出，形成一个空位时：① 破坏点阵的周期排列；② 晶体产生膨胀，形成一个空位时约增加半个原子体积 Ω；③ 引起少量的点阵畸变。

在一定能量条件下晶体中两个单空位有可能结合成为空位对（vacancy pair或divacancy），如图1-1所示。



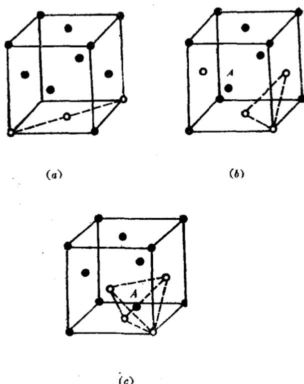
·—结点上存在原子，
○—结点上无原子为空位

图1-1 面心立方晶体中的双空位

假如晶体中有三个空位结合在一起则称为三空位（trivacancy）。图 1-2 为面心立方金属铜中三空位可能的几种形式。三个空位成直线排列的如图(a)，这三个空位彼此不是最近邻的，从能量角度看这种结构最不稳定。图(b)中的三个空位是最近邻的，所以更为稳定，且它们之间的键合也更有利。图(c)表示三空位附近的A原子松驰进入四个空位的中心，即由三空位进一步演变成空位四面体中间含有一间隙原子，当然也可以四个空位或更多的空位结合在一起形成空位群。为了与空位群相区别，在光学显微镜和电子显微镜下可以观察到的大的空孔称之为空洞（void）。

二、间隙原子

金属晶体大多是体心立方、面心立方和密排六方结构。这些晶体中都有间隙位置，进入晶体点阵间隙位置的原子称为间隙原子。这种间隙位置通常是晶体点阵的最大空隙位置，在一般情况下不应该有原子存在。间隙原子可以是晶体本身固有的原子，也



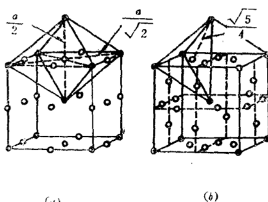
（a）直线排列；（b）平面结构；（c）四面体结构，其中的A原子松弛到四面体中心

图1-2　面心立方晶体中三空位的几种可能形式

可能是外来的尺寸较小的杂质原子。为了区分，通常称前者为自间隙原子。

体心立方晶体中的间隙位置有八面体和四面体两种，八面体间隙中心在[$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$，0]及其等效位置，即在晶胞各面的中心，如图1-3(a)所示。显然，体心立方晶体的八面体间隙是不对称的，可以看出间隙中心距上下两原子的距离为$\frac{a}{2}$，而距其余四个原子的距离为$a/\sqrt{2}$。八面体的间隙半径r约为0.154原子半径。

体心立方晶体四面体间隙中心在[$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{4}$，0]及其等效位置，如

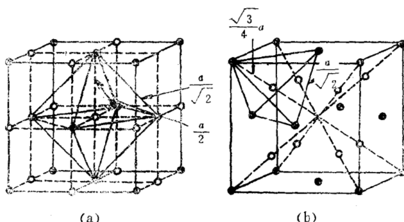


(*a*) 八面体位置；(*b*) 四面体位置

图1-3　体心立方晶体的间隙位置

图(*b*)。可以看出间隙中心与相邻四个原子的距离皆为$\frac{\sqrt{5}}{4}a$，表明四面体间隙是对称的。四面体的间隙半径r约为0.291原子半径。

面心立方晶体中的间隙位置也有八面体和四面体两种。八面体间隙中心在$[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$及其等效位置，即在晶胞的体心位置，见图1-4(*a*)。显然面心立方晶体八面体间隙与体心立方晶体的八

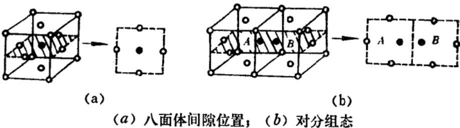


(*a*) 八面体位置；　　　(*b*) 四面体位置

图1-4　面心立方晶体的间隙位置

面体间隙相似，但前者间隙是对称的。因为间隙中心距相邻的六个原子的距离是相同的，皆为$a/2$，八面体间隙半径r约为0.41原子半径。面心立方晶体四面体间隙中心在$[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$及其等效位置，如图1-4($b$)所示。与体心立方晶体一样，面心立方晶体的四面体间隙也是对称的，四面体的间隙半径r约为 0.225 原子半径，可以看出较八面体间隙明显要小。

根据能量计算表明，在面心立方晶体中自间隙原子的稳定位置并不如图1-5(a)所示的在八面体间隙的中心，而是按图1-5(b)所示的组态。也就是说原来在体心位置的间隙原子A要把原来在面心上的原子B沿(100)方向挤开一些。这种组态能量稍低一些，称为对分组态，因为有两个原子共有一个晶格位置。同样也有(110)型和(111)型对分间隙原子。



(a) 八面体间隙位置；(b) 对分组态

图1-5　面心立方晶体中的对分组态间隙原子

间隙原子还可以有第三种形式即珠链组态，如图 1-6 所示。可以看出沿(110)密排方向有($n+1$)个原子挤在 n 个原子位置上。间隙原子以这种方式组态可使点阵畸变减小。以高速中子辐照铜就有可能出现这种情况。

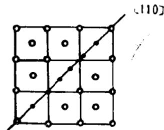


图1-6　面心立方晶体中间隙原子的珠链组态

密排六方晶体也有八面体间隙和四面体间隙，与面心立方晶体相比两种晶体结构的八面体和四

面体形状完全相似，但位置不同。在原子半径相同的条件下两种间隙位置的大小也都相同。

由以上讨论可知，间隙原子使晶体点阵产生：① 局部周期性排列遭到破坏；② 晶体也产生膨胀，每个自间隙原子引起体膨胀大于一个原子体积Ω；③ 引起的畸变比空位大。

由于空位和间隙原子只有一个原子大小的尺度（10^{-8}cm），所以很难通过实验进行直接观察，用场离子显微镜能够分辨金属表面上的原子排列，可以直接观察到金属表层中的空位位置，但目前还很难观察出更多事实。

三、离子晶体中的点缺陷

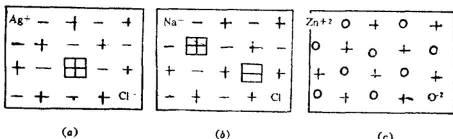
在离子晶体中，点缺陷的存在受到晶体必须保持电中性的约束。带有正、负电荷的点缺陷以多种形式保持电平衡而存在于晶体中。图1-7表示了离子晶体中三种正负电荷平衡的缺陷类型。

（1）弗兰克尔缺陷由相同数量的同号电荷离子空位和间隙离子组成。

（2）肖脱基缺陷由相同数量的正负离子空位组成。

（3）间隙原子呈电中性，在高温时可能离子化。

很明显，形成能最低的那种缺陷将占优势，实验证明在金属和卤化碱晶体中最常见的缺陷都是肖脱基缺陷。



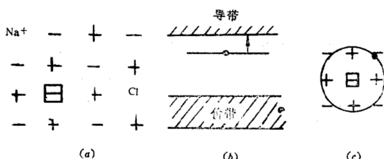
（a）弗兰克尔缺陷；（b）肖脱基缺陷；（c）间隙原子

田——正离子空位，日——负离子空位

图1-7　离子晶体中电荷平衡的点缺陷

本世纪20年代波尔（Pohl）和他的同事从卤化碱晶体入手开始了色心的研究工作。自那以后的数10年间，色心在固体物理的研究中占据重要的地位。色心这个术语原来是专门对卤化碱晶体中的固有缺陷使用的，现在已把它用于使绝缘体着色的包括杂质在内的所有缺陷了。

卤化碱晶体中的导带能级和阶带能级之间的带隙的典型值为9～10eV。具有适当能量的光子可使卤离子释放出电子，同时产生空穴。与此过程相对应，有一个电子从价带移入导带。在NaCl中，如果Cl^-离子缺位[图1-8(*a*)]，其周围离子的电子能量降低了，即在缺位近邻的钠离子上的电子所受束缚比其他钠离子上的电子更紧。带正电的Cl^-离子缺位将束缚一个电子为最近邻的六个Na^+离子所共有。晶体受激时这个束缚的电子就可能跃迁到导带中去[见图1-8(*b*)]。通常将电子被负离子空位俘获的缺陷称为*F*心，见图1-8(*c*)。

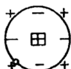


(*a*) NaCl中Cl^-离子缺位；(*b*) 能带结构；(*c*) *F*心示意图

图1-8　*F*心

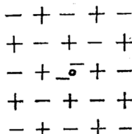
同样，如果在晶体中存在正离子空位，空穴也可被俘获，这种缺陷称为*V*心(图1-9)。

还有一种令人感兴趣的缺陷是*H*心。它是俘获了一个空穴的负间隙离子。图1-10为分布在五个负离子位置上的六个卤族元素的核，它与图1-6中间隙原子的珠链组态相似。



田——正离子空位；○——空穴

图1-9　离子晶体中的V心



○——空穴

图1-10　离子晶体中的H心

§2　点缺陷的平衡浓度

一、单空位的平衡浓度

假如在N个原子组成的晶体中形成n个空位，必须将n个原子移至晶体表面，为此需要作功，因而晶体内含有空位时内能增加，若形成一个空位所需的内能为u，则形成n个空位所需要的能量为nu。另一方面，在晶体中形成n个空位后，改变了原来相同原子聚集的状态，而成为N个原子和n个空位组成的混合物。因而使晶体中分布这些空位的方式增加，增加了晶体的熵值，称为混合熵（或组态熵），以S_c表示。此外形成一个空位后，邻近原子热振动的振动频率发生变化，引起熵的变化，称为空位形成熵，以S_f表示。根据热力学原理，系统的自由能为

$$F = U - TS \tag{1-1}$$

式中，U为内能，S为总熵值($S = S_c + nS_f$)，由式(1-1)可知，由于熵的增加，使自由能下降。所以，根据此式可求出空位平衡浓度。

由统计热力学知道混合熵与排列方式有关。应用波茨曼公式

$$S = k\ln w \tag{1-2}$$

式中，k为波茨曼常数，w为空位可能排列方式的数目，即

$$\omega = \frac{N!}{(N-n)!n!} \tag{1-3}$$

代入式(1-2)得混合熵为

$$S = k\ln\frac{N!}{(N-n)!n!} \tag{1-4}$$

由斯特令（Stirling）公式

$$\ln N! \approx N\ln N - N$$

则式(1-4)可写成

$$S = k[N\ln N - (N-n)\ln(N-n) - n\ln n]$$

若再考虑到形成熵为nS_f则自由能增量为

$$F = nu - kT[N\ln N - (N-n)\ln(N-n) - n\ln n] - nTS_f$$

当某一温度时，晶体内含有n个空位以达到平衡，此时要满足自由能最低的条件，即

$$\left(\frac{\partial F}{\partial n}\right)_T = 0$$

得
$$u - TS_f + kT\ln\left(\frac{n}{N-n}\right) = 0$$

$$\frac{n}{N-n} = e^{\frac{S_f}{k}} \cdot e^{-\frac{u}{kT}}$$

一般情况下，$n \ll N$，空位浓度$c = \frac{n}{N} = \frac{n}{N-n}$

所以可求得空位平衡浓度为

$$C = \frac{n}{N} = e^{\frac{S_f}{k}} \cdot e^{-\frac{u}{kT}} = A\, e^{-\frac{u}{kT}} \tag{1-5}$$

式中，$A=\exp(S_f/k)$，表示空位形成熵项。

由式(1-5)可知温度越高，空位浓度越高。例如根据实验确定铜每个空位形成能平均为1eV，若A取1（比实验值小），则铜晶体中空位浓度与温度的关系如图1-11所示。可以看出，1000℃时，在1万个原子中约有一个空位。表1-1给出了一些金属的空位形成能和混合熵的参考值。

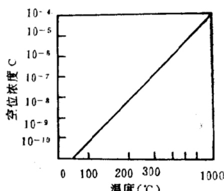


图1-11 铜的空位浓度与温度的关系

二、双空位的平衡浓度

在热平衡时可能有一部分单空位结合形成双空位（空位对）或三空位。平衡空位对的浓度也可根据自由能最小的稳定条件求出。

设单空位的形成能为u_s，双空位的形成能为u_d，则

$$u_d=2u_s-E_b,\quad 或E_b=2u_s-u_d \tag{1-6}$$

表1-1 金属空位形成能和形成熵的测定值

金　　属	空位形成能u(eV)	空位形成熵A
Al	0.75	0.11
Cu	0.90	4.5
Ag	1.10	4.5
Au	0.67	2.7
Pt	1.5	
W	3.3	

式中，E_b为空位的结合能，可以理解为两个单空位结合成双空位时要放出能量，或者说要把双空位分离成两个单空位时需作的功。

与前面单空位时的情况相同，设晶体中的原子总数为N，空位的总数为n，单空位数为n_1，空位对的组数为n_2，则

$$n = n_1 + 2n_2$$

换成浓度表示，则

$$C = C_1 + 2C_2$$

式中，C为空位浓度，C_1为单空位浓度，C_2为双空位浓度；而且$C = n/(N+n)$，$C_1 = n_1/(N+n)$，$C_2 = n_2/(N+n)$。

由于$n \ll N$，$n_1 \ll N$，$n_2 \ll N$，所以：

$$C = n/N,\ C_1 = n_1/N,\ C_2 = n_2/N$$

如果只考虑混合熵，就求出空位对存在时晶体的自由能，再根据平衡时自由能最低的条件求出空位对的平衡浓度为

$$C_2 = \frac{n_2}{N} = \frac{z}{2}\exp\left(\frac{-u_d}{kT}\right)$$

式中，z为配位数。

由式(1-6)及(1-5)得

$$C_2 = \frac{n_2}{N} = \frac{z}{2}\left(\frac{n_1}{N}\right)^2\exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)$$

$$= \frac{zC_1^2}{2}\exp\left(\frac{E_b}{kT}\right) \qquad (1\text{-}7)$$

应注意式(1-5)中的C是按没有空位对的情况计算的空位浓度，现为有空位对的情况，故单空位用C_1表示，式(1-7)可改为

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{z}{2}C_1\exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)$$

由于$C_1 = A\exp(-\frac{u_s}{kT})$，设$A=1$，则

$$\frac{C_2}{C_1}=\frac{z}{2}\exp\left(\frac{E_b-u_s}{kT}\right)=\frac{z}{2}\exp\left(\frac{u_s-u_d}{kT}\right) \quad (1\text{-}8)$$

讨论：

① 式(1-8)表示当温度变化时，在热平衡条件下空位对与单空位浓度之比。从目前来说还不能确切地知道E_b的值，但面心立方金属空位结合能E_b的理论值为0.06～0.5eV之间，所以$E_b<u_s$。因而，$E_b-u_s<0$，因此在热平衡时晶体中空位对与单空位之比值随温度上升而增加。

② E_b越大，C_2越高，则$\frac{C_2}{C_1}$值越大；

如假设：$u=1\text{eV}$，$E_b=0.2\text{eV}$，$T=1000℃$，$z=12$，则$\frac{C_2}{C_1}=0.4\%$，当$E_b=0.3\text{eV}$时，则$\frac{C_2}{C_1}=1\%$。由此可见空位对相对于空位来说是很少的。

三、间隙原子的平衡浓度

间隙原子的平衡浓度可以用计算空位平衡浓度相似的方法求得。假设晶体中可以进入间隙原子的间隙位置数为N，间隙原子数为n，间隙原子形成能为u'，间隙原子形成熵为S_f'，则间隙原子的平衡浓度C'为

$$C'=\frac{n}{N}=\exp\left(\frac{S_f'}{k}\right)\exp\left(-\frac{u'}{kT}\right)$$

但间隙原子的形成能u'比空位形成能u高，仍以铜为例，u'约为3eV。若形成熵项$\exp(\frac{S_f'}{k})$作为1，则可求得间隙原子平衡浓度如下。

℃　　500℃　　1000℃

10^{-55}　　10^{-22}　　10^{-12}

也就是说相对于空位，间隙原子是很少的，可以忽略不计，即在热平衡状态下金属晶体中只有空位点缺陷存在，但是金属经高能粒子（如中子）辐照后可产生相等数量的空位和间隙原子，在这种情况下两种点缺陷都将起重要作用。

总之，热平衡时点缺陷的浓度公式可写成一般形式

$$C=\frac{n}{N}=\exp\left(\frac{S}{k}\right)\exp\left(-\frac{u}{kT}\right) \tag{1-9}$$

由式(1-9)可知影响点缺陷平衡浓度的因素为温度T，形成能u和形成熵S。S越大，浓度越大；形成能越大，浓度越低；温度越高，浓度越高。因此可以得到如下推论：

① 由于形成能对热平衡点缺陷浓度的影响是按指数规律变化的，所以u值微小的变化就会引起浓度很大变化。因而一个晶体中几种点缺陷同时存在的机会就很小。那一种点缺陷的形成能低，将是该晶体的主要缺陷类型。

② 要彻底了解热平衡缺陷，必须对点缺陷形成能和形成熵作透彻的研究。

§3　点缺陷形成能

点缺陷破坏了原子的规则排列，并且在周围晶体中引起一定的弹性畸变，导致晶体内能增高，因此可以认为点缺陷具有能量，并称之为点缺陷形成能。点缺陷的形成能与晶体体积有关，与原子热振动也有关，所以它们与温度有关。但是实际上精确计算点缺陷形成能是相当复杂的事情，所以只对一些面心立方金属，特别是贵重金属做过这种计算。

对于金属晶体，点缺陷形成能来自两个方面：一是自由电子

运动状态发生变化引起的能量，这主要是考虑到点缺陷对自由电子波的散射以及电子动能因电子云密度改变而发生的变化。二是点缺陷周围产生了畸变，有畸变能的变化。现只以单价金属(Cu、Ag、Au)为例对空位形成能的计算作简略介绍。

在大多数理论计算中，应用了如下的空位形成能定义，即从晶体内的正常点阵位置上取出一个原子放到晶体表面（图1-12）所作的功。由于晶体表面是粗糙的，所以在其上加入一个原子并不增加表面积，而只增加一个原子体积。

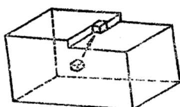


图1-12　空位的形成

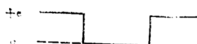


图1-13　空位附近的电荷分布

假设金属中正离子的正电荷（$+e$）是均匀分布的，而价电子以自由电子的形态在晶体中运动。空位的形成就是先把一个正离子取出放到晶体表面上，并把它所带的正电荷均匀地分摊到整个晶体，以抵消它的价电子使整个晶体仍保持中性。这时将引起下列能量变化：

一、电子势能变化

从静电学观点考虑，空位处相当于安放一个零价的溶质原子，若整个晶体为1价金属，则空位与整个晶体的价差 $z=0-1=-1$。即空位附近的电荷（见图1-13）为

$$ze=-e$$

引起晶体中在距离为r处的附加电势V为

$$V=\frac{ze^2}{r}$$

它与自由电子的电荷作用会引起附加能量。由于屏蔽效应，使空位周围的自由电子被排斥开，而被异号电荷所包围。这样达到平衡状态后，附加电场就被屏蔽在局部范围内。利用费米-托马斯近似，可求得附加电势为

$$V_p = \frac{ze^2}{r}\exp(-qr)$$

式中，V_p为静电分布在距空位中心r处产生的静电势，q为常数，当r大于$\frac{1}{q}$数倍时，$V_p=0$，因此$\frac{1}{q}$相当于屏蔽半径。

设电子浓度为n，则由空位引起的静电能的增加E_1就等于nV_p的体积分：

$$E_1 = n\int_0^R 4\pi r^2 V_p dr$$

式中，R表示积分区域半径。对于自由电子，计算得到

$$E_1 = \frac{2}{3}E_F$$

式中，E_F为费米能。由此可见，空位引起静电能的增加而使晶体能量增加。

二、电子动能变化

由于从晶体中取出正离子放到晶体表面的台阶上（不增加表面积），使晶体体积膨胀一个原子体积，自由电子气膨胀，而造成电子动能降低为

$$E_2 = -\frac{2}{5}E_F$$

在面心立方晶体中形成一个空位所产生的其它畸变若可以忽略不计，则空位形成能等于

$$u = E_1 + E_2 = \frac{2}{3}E_F - \frac{2}{5}E_F = \frac{4}{15}E_F \qquad (1\text{-}10)$$

这样求出的空位形成能约等于费米能的1/3，大致与实验结果符合。如考虑到铜中空位的周围原子略有松驰可降低一些能量，则最终得到的空位形成能可与实验值较接近。

从计算可以看出空位形成能中，电子能量是主要的，畸变能较小；而间隙原子形成能中，畸变能是主要的，电子能量较小。计算结果表明，间隙原子形成能较大，比空位大几倍。

除上述用自由电子理论计算空位形成能以外还可以用金属的熔点和原子对作用能来计算空位形成能，即一部分密堆结构金属的空位形成能可分别表达为金属熔点的函数或原子对作用能的函数。

三、空位形成能的实验测定

金属晶体从高温淬火，可以将其在高温时所存在的空位暂时保留下来，形成在低温的过饱和空位数。这些过多的空位随后运动到晶界、晶体表面和位错处逐渐消失。当它尚未消失之前，过多的空位使导体电阻率加大，可以通过测定所增加的电阻率来确定过饱和的空位数。进一步讲，从各种不同的高温将金属淬火到室温得到不同的空位浓度，因此也将有不同的电阻率。如果以室温时的平衡空位浓度的电阻率为基准，则电阻率的差值$\Delta\rho$反应了过饱和空位浓度。若以T_q表示淬火温度，以T_a表示测定的室温温度。由于电阻率差值$\Delta\rho$与浓度差ΔC成一定比例，则可得下式

$$\Delta\rho \propto \Delta C = A\exp\left(-\frac{u}{kT_q}\right) - A\exp\left(-\frac{u}{kT_a}\right) \qquad (1\text{-}11)$$

由于式(1-11)右边的第二项相对来说很小可以忽略，所以

$$\Delta\rho = A\exp\left(-\frac{u}{kT_q}\right)$$

取对数，$\ln\Delta\rho=\ln A-\frac{u}{k}\ \frac{1}{T_q}$

显然，$\ln\Delta\rho$与$\frac{1}{T_q}$成直线关系，由实验测得不同温度淬火后电阻率的差值，然后作直线图，可求出直线的斜率$(-\frac{u}{k})$即可求得空位形成能。图1-14为由不同温度淬火的金和铜的电阻差值与淬火温度的关系，用此法求得铜的空位形成能为0.90eV，金的空位形成能为0.67eV。这种方法是较好的一种，但它也存在缺点，这是因为在淬火时可能发生空位的聚集和消失。因而，实验所得数值的误差较大。此外，位错的作用不清楚，因为淬火温度不同，位错密度也发生改变。

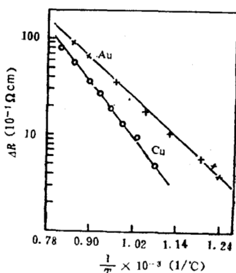


图1-14　不同淬火温度下Cu和Au的电阻率差值与淬火温度的关系

4§　形成熵的计算

在第二节中曾经提到形成熵S_f。关于它的计算根据量子理论，一个做简谐振动的谐振子的平均能量等于$E(v)=\frac{1}{2}hv+hv/(c^{hv/kT}-1)$。其中$h$为普朗克常数，$v$为振动频率，$\frac{1}{2}hv$是振子的零点能量。晶体中的原子在它的点阵结点上作振动，晶体是谐振

子的一个集合体。在固体物理学中已经证明，晶体与振动有关的自由能（Helmholtz自由能）F可以写成（略去零点能量）：

$$F=-kT\sum\ln\left[1-\exp\left(-\frac{h\nu_i}{kT}\right)\right]^{-1}$$

或 $$F=kT\sum\ln(1-e^{-\frac{h\nu_i}{kT}}) \qquad (1\text{-}12)$$

其中求和是对晶体的所有简正振动频率求和。由热力学公式，熵与自由能的关系是：$S=-(\partial F/\partial T)v$，即在体积不变下对温度的偏微分。假如测试的温度比德拜温度 H_D 高即 $kT\gg h\nu_i$，则式(1-12)微分时可略去较小的项，得

$$S=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_v=-k\sum_i\ln(1-e^{-\frac{h\nu_i}{kT}})$$

展开$e^{-h\nu_i/kT}$，得$e^{-h\nu_i/kT}\approx1-\frac{h\nu_i}{kT}$，于是

$$S=-k\sum_i\ln\left(\frac{h\nu_i}{kT}\right) \qquad (1\text{-}13)$$

这个熵值就是形成熵。现在，若在晶体中引进一个空位，则ν_i将受到影响，以ν_{io}表示没有空位时第i 个简正振动频率，ν_{if}表示有空位时的频率，由式(1-13)得知，引进一个空位产生的熵变化等于：

$$S_f=-k\sum_i\ln\left(\frac{h\nu_{if}}{kT}\right)+k\sum_i\ln\left(\frac{h\nu_{io}}{kT}\right)$$

即： $$S_f=k\sum_i\ln\left(\frac{\nu_{io}}{\nu_{if}}\right) \qquad (1\text{-}14)$$

S_f的准确计算是很困难的。在空位附近的原子向空位推移所需要的力，显然要比完整的晶体中的原子作同样的推移要小一些，这说明$\nu_{if}<\nu_{io}$，所以式(1－14)可以定性地确定$S_f>0$。

§5 点缺陷的运动

晶体中的空位和间隙原子不是在点阵结点上静止不动的，而是以平衡位置为中心不停地作热振动。温度低的时候，原子振动微弱，随着温度升高，振动加剧，振幅增大，但是频率基本不变。原子的热振动具有起伏的性质，表现为任何时候，晶体中各处原子的振幅总是有大有小；而对于某一个原子来说，它的振幅和能量则随着时间在平均值附近忽大忽小地变化。

一、点缺陷的迁移

热振动和能量起伏给点缺陷带来了迁移运动的可能性。空位不是固定于哪一个原子位置上，而是不断地与周围原子交换位置，空位在晶体中的平衡分布是一个动态的平衡。当空位周围的原子由热振动和能量起伏获得足够的能量时就会跳入空位，其结果是那个原子和空位交换了位置。图1-15表示空位的迁移过程。

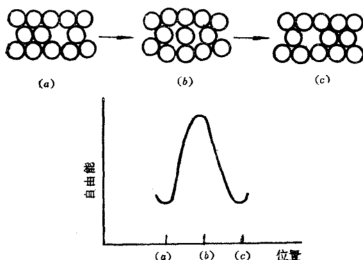


图1-15 空位的迁移

图(a)和(c)分别表示空位迁移前后的两个状态。从图(a)到(c)空位向左迁移了一个原子间距，实际上是A原子跳入空位B。实现这个过程要经过图(b)所示的过渡状态。这必须要将C和D两个原子拉开才能顺利跳入空位B来实现A与B的交换。或者说点缺陷从一个平衡位置转移到另一个平衡位置要经过一个过渡状态，而这时点阵有较大的畸变，能量较高，如图(d)，这个状态称为鞍点状态。这一空位迁移所必须要达到的鞍点状态能量和平衡状态能量之差称为空位迁移激活能，或称为迁移能E_M。

因而，A原子的跳入空位除了应具备与空位相邻的几何条件外，还需要通过能量起伏获得足够的自由能使它达到鞍点状态。因此空位迁移的几率也要取决于周围原子获得足够自由能的几率。而空位在单位时间内的迁移几率首先取决于空位的近邻原子数，即配位数z。

设在等温等压下空位周围原子跳动一个位置所需的迁移能为E_M，振动频率为ν，配位数为z则单位时间内空位的迁移几率j为

$$j = \nu z e^{\frac{S_M}{k}} e^{-\frac{E_M}{kT}} \approx A_M \nu z e^{-\frac{E_M}{kT}} \qquad (1\text{-}15)$$

式中，E_M为点缺陷迁移能，S_M为迁移熵，即原子振动频率改变而引起的熵变，$A_M = \exp(\frac{S_M}{k})$。

由式(1-15)可知，空位迁移几率取决于绝对温度T，迁移熵S_M和迁移能E_M。T越高，E_M越低则j越高。而S_M越低则j也越低。

面心立方金属，$z = 12$，设$\nu = 10^{13}s^{-1}$，$e^{S_M/k} = 1$，取空位迁移能分别为$E_M = 1eV$和$0.5eV$，则按下式可计算出j值(见表1-2)。

$$j = 10^{14}\exp\left(-\frac{E_M}{kT}\right)$$

由表中数据可以看出空位的迁移几率对温度是极敏感的。间

表1-2 不同温度和空位迁移能时的空位迁移几率

温　　度	$E_M = 1\text{eV}$时	$E_M = 0.5\text{eV}$时
$T_1 = 300°K$	$j_1 = 4\times10^{-4}s^{-1}$	$j_1 = 2\times10^{5}s^{-1}$
$T_2 = 600°K$	$j_2 = 2\times10^{5}s^{-1}$	$j_2 = 4.5\times10^{9}s^{-1}$
$T_3 = 1000°K$	$j_3 = 6\times10^{8}s^{-1}$	$j_3 = 2.5\times10^{11}s^{-1}$

隙原子的迁移几率表达式与空位迁移几率表达式相同。

二、空位迁移能

空位运动与扩散有密切关系，扩散时的一个很重要方程式

$$D = D_o\exp(-Q/RT)$$

就与空位迁移几率 j 的方程式(1-15)有关。式中D为扩散系数，与 j 有关，D_o为扩散常数或称为频率因子，与$vze^{\frac{SM}{k}}$有关，R为气体常数，Q为自扩散激活能。当通过空位扩散时

$$Q = u + E_M$$

即扩散激活能为空位形成能与空位迁移能之和。因而可以通过自扩散实验求得扩散激活能Q，然后求出它与空位形成能 之差，即为空位迁移能。表1-3是单空位迁移能E_M的计算值。实验证明，在贵金属中单空位的迁移能E_M在0.6～1eV之间。

Couchman用点阵动力学的原理推导出纯金属中单空位迁移能和熔点T_m之间有一个简单的关系即

$$E_M = 0.66\times10^{-3}T_m\text{eV}$$

由该式所求得的理论计算值与表1-3所求得数值很接近。应当指出，由于原子在鞍点状态是不平衡的，很难精确计算其能量。因此，

表1-3　单空位迁移能E_M

金　属	自扩散激活能Q(eV)	空位形成能u(eV)	空位迁移能E_M(eV)
Au	1.81	0.98	0.83
Ag	1.92	1.10	0.82
Cu	2.15	1.24	0.91
Al	1.25	0.70	0.55

点缺陷迁移能的计算存在很大差别。

用淬火空位进行退火的方法也可以求得空位迁移能，先把金属丝淬火到低温可得到过饱和空位，测量其附加电阻。再在一定温度下退火，则不平衡的空位浓度会随着退火时间的延长而逐渐消失，附加电阻逐渐下降，这样可以得到电阻变化$\Delta\rho$与退火时间t之间的关系曲线。

假设能使空位消失的场所的数量不变，则过饱和空位浓度ΔC的减少速度与过饱和空位浓度ΔC及$\exp(-E_M/kT)$成正比，即

$$-\frac{d(\Delta C)}{dt}=B\Delta C\exp\left(-\frac{E_M}{kT}\right) \tag{1-16}$$

式中，B是比例常数，它与空位消失处的数量、配位数、迁移熵等因素有关，t是退火时间。将式(1-16)积分，并设最初$t=0$时的电阻增量为$\Delta\rho_0$得

$$-\ln\frac{\Delta\rho}{\Delta\rho_0}=B' t\exp\left(-\frac{E_M}{kT}\right) \tag{1-17}$$

图1-16表示金丝的$\ln\frac{\Delta\rho}{\Delta\rho_0}$与$t$的关系。由于式(1-17)中有$B'$及$E_M$两个未知数，所以根据一条直线关系不能求出空位迁移能E_M。因此，必须求出两个不同温度时的电阻随时间的变化关系如图1-17所示。通过求不同温度时直线的斜率可以求出空位的迁移

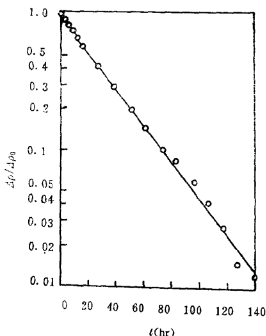


图1-16 Au700℃淬火后在60℃时电阻随时间的变化

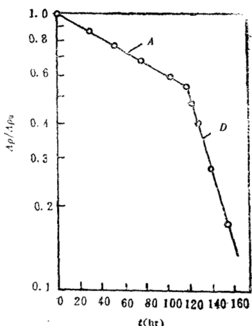


图1-17 Au700℃淬火后分别在40℃(*A*)及60℃(*D*)时电阻随时间的变化

能 E_M。用这样的方法求得的金的空位迁移能为0.6～0.8eV。

三、点缺陷的消失

由于间隙原子的形成能比空位大得多，在大多数金属中，热平衡时主要的点缺陷是空位。因而，平衡空位不能在完整晶体中以简单的形成空位-间隙原子对的方式产生。也就是说空位必然要从适当的空位源产生（或消失），并且扩散到晶体的完整区域，以便使远离空位源区域中的空位浓度达到平衡。晶体的自由表面是明显的空位源，因为在这里对原子脱离正常振动的限制很小。原子错配严重的晶界也是有效的空位源。

由于位错可以攀移运动，位错在控制点缺陷平衡浓度方面起着重要作用。1952年Bardeen和Herring曾指出，该过程的推动力具

有每单位长度位错线$(kT/b^2)\lg(C/C_o)$的数量级，式中b为位错柏氏矢量，C_o为点缺陷的平衡浓度，C为实际浓度，刃型位错和螺型位错都能作攀移运动，在点缺陷未饱和和过饱和的条件下分别起着产生与吸收点缺陷的作用。如Seitz提出螺型位错攀移时会形成蜷线位错，这已在氟化物，氯化物以及硅晶体中得到证实。

参 考 文 献

1. Damask A. C and Dienes G. J, Point defects in metas, Gordon and Breach, 1963
2. Cahn R. W, Physical Metallurgy, North-Holland, 1983
3. Kovacs I, Point defects in metals, Journal of materials science, 11(1976)529～559
4. Henderson B, 晶体缺陷，范印哲译，高等教育出版社，1983
5. Seeger A等, Vacancies and Intertitals in metals, North Holland, 1970
6. 幸田成康，金属物理学序论，コロナ社，1978
7. 日本金属学会编，格子欠陷，丸善株式会社，1979
8. 日本金属学会编，転位论，丸善株式会社，1971
9. 赖祖涵，金属的晶体缺陷与力学性质，冶金工业出版社，1988

习题与思考题

1-1　设在铜中形成1克分子空位的能量为83.6kJ，形成熵为$1.0K$，其中K为波尔茨曼常数，计算在20℃和铜的熔点时，每立方厘米铜中空位的数目。铜的密度为$8.94 g/cm^3$。

o + o + o + o + Fe^{+2}, Fe^{3+},
+ o + o + o + o
o + o + o □ o +
+ o □ o + o + o O^{-2}
o + o + o + o +
+ o + o + o + o

图1-18 （习题）FeO结构缺陷（符合□表示一个离子空位）

1-2. 图1-18中假如每10个Fe^{3+}离子对100个Fe^{2+}离子，则正离子空位的百分数是多少?

1-3. 金属晶体的空位形成能分别为 1eV和1.2eV，算出温度为1000°K时的空位粗略浓度。设形成熵项系数$A=1$。

第二章　线缺陷的基本性质

§1　引　言

线缺陷的实际含义就是位错。大约在19世纪时，通过观察金属的塑性变形所形成的滑移带，已经对认识位错有了启发。但仅当发现金属是结晶体后，才知道滑移是晶体的一部分相对于另一部分沿一定晶面的剪切变形，也才有了明确提出位错图像的可能性。此外，沃特拉（Volterra）等在研究均匀的各向异性的介质的弹性行为时，就曾研究过带切口的圆筒经受如图2-1的变形情况。这些变形有的导致形成弹性体中的位错。然而，迟至本世纪

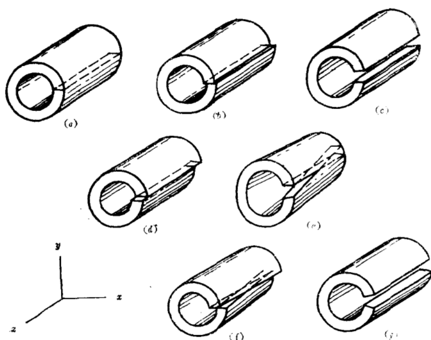


图2-1　(a) 带切口的圆筒；(b) ～(d)位错；(e) ～(g)旋错

30年代，当位错已被有根据地假定为一种晶体缺陷时，弹性力学的上述工作与晶体滑移之间的联系才得到注意。

位错作为一种晶体缺陷被实际提出来，是基于下列许多现象：x射线衍射、晶体生长，尤其是我们已知的剪切强度计算，发现若把晶体看成是理想的、完整的，则得到的结果与实验结果差别很大，这种晶体缺陷假说被公认是1934年由泰勒（Taylor）、奥罗万(Orowan)和波朗依(Polanyi）三人在这一年分别提出的。

晶体中的位错有两种基本类型：刃型位错与螺型位错。了解这两种类型位错的晶体几何特征，是掌握位错理论的基础，现以简单立方晶体为例，加以介绍。

一、简单立方晶体中的刃型和螺型位错

设在完整的简单立方晶体中[图2-2(a)]出现了刃型位错[图2-2(b)]和螺型位错[图2-2(c)]。刃型位错的基本特点是在晶体

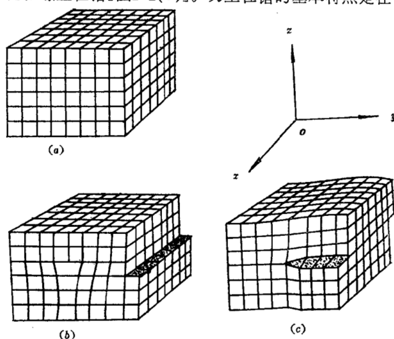


图2-2 刃型位错与螺型位错

的某一面以上多出一个与之垂直的所谓半原子平面。螺型位错则是晶体两平面的一部分相对移动一个原子间距。由于位错的存在，晶体中出现了一个区域，那里的原子排列偏离正常位置。在刃型位错中，此区域在沿刃口一带；在螺型位错中，原子在此区域呈螺旋状分布。无论哪种情况，晶体中大部分原子仍然是按完整晶体中的位置排列。有位错的晶体在受到外力作用时位错部分的原子很容易产生移动。并且在位错移动到晶体表面时产生一个原子间距的台阶，与此同时位错消失。多个位错运动就能产生滑移线。因此，实际晶体中存在位错这种缺陷，就能圆满地解释完整晶体与实际晶体中强度的巨大差别。不仅力学行为，位错在晶体其它性能上作用亦很大。

二、位错的柏格斯矢量（柏氏矢量）

柏氏矢量代表着位错所能产生的变形的大小和方向，因此是位错的重要特征。下面介绍弗兰克求位错柏氏矢量的方法。图2-3中有用做参考的完整晶体和有刃型位错的晶体。位错线与纸面垂直。设位错线正方向是从纸背指向纸面。以右手螺旋法则从离位错一定距离处的原子M出发，环绕位错作一个逆时针方向的沿原子中心的闭合回路。同时在完整晶体中也按同样方式作回

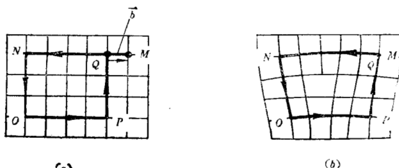


图2-3　刃型位错的柏氏矢量的求法

路，这个回路的终点O与起点M必不重合。规定从O到M的这个矢量为该位错的柏氏矢量，并写成$\vec{b}$。它对每一个位错是唯一的，不随回路的大小和形状变化；但却随回路的方向而变。刃型位错的$\vec{b}$是垂直于位错线的。

螺型位错的柏氏矢量也可用同样道理求出（图2-4）。应当注意螺型位错的$\vec{b}$与其位错线是平行的。这也决定了螺型位错只能是直线形的。刃型位错却不是这样，因为$\vec{b}$与其位错线垂直，所以刃型位错线可以是任意形状的平面曲线。

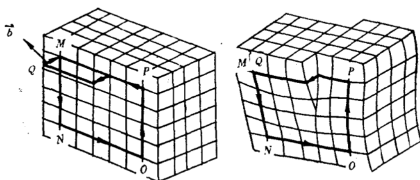


图2-4 螺型位错的柏氏矢量的求法

实际上存在的位错通常不是直线的，也不是纯粹刃型或螺型的。图2-5的位错虽是直线的，却有与其呈θ角的$\vec{b}$，因此，这个位错是一种混合位错，它可以分解成刃型分量与螺型分量。图2-6

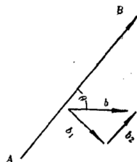


图2-5 混合位错分解成分量

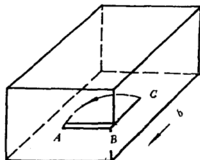


图2-6 平面混合位错

则是更一般的混合位错，位错线AC是曲线，其各部分的刃、螺分量是不同的。至此，对位错可作如下概括：

（1）位错是晶体中原子排列的一种线性缺陷。但它并非几何学上的线，而是有一定宽度的“管道”，管道的横截面不大，相对地说长度一般不短，位错线的形状可以是任意的空间曲线。

（2）位错线必定在晶体中形成一个封闭的曲线；或者虽不封闭，但终止在晶体的界面或表面上，不能终止在晶粒或晶体内部。

（3）位错把晶体中变形部分与未变形部分区别开来，这两部分都是完整晶体。

（4）在位错线附近有原子错排，错排程度距位错越远越小，整个错排的程度用柏氏矢量代表，每一根位错线只有一个柏格斯矢量。

由此可见，刃型位错与螺型位错是特殊而简单的两种基本类型。

此外，位错还可以分岔，分开后的位错矢量之和等于分岔前的矢量，如图2-7所示。$\vec{b}_1=\vec{b}_2+\vec{b}_3$。

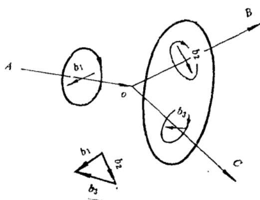


图2-7　位错的节点

分岔点称为节点。不难判断，如果OB与OC也走向节点，则其柏氏矢量将反向，即$\vec{b}_1=-(\vec{b}_2+\vec{b}_3)$或$\sum\limits_i\vec{b}_i=0$。这说明流向节点的各位错线的柏氏矢量的总和等于流出节点的各位错线的柏氏矢量的总和。

三、刃型位错及其运动

刃型位错的位错线与其柏氏矢量垂直，位错线与柏氏矢量组

成的面叫滑移面。多余半原子面在晶体上半部的刃型位错叫正刃型位错；多余半原子面在晶体下半部的叫负刃型位错。通常用“⊥”这个符号代表正刃型位错，“T”这个符号代表负刃型位错。在位错线方向、柏氏矢量和多余半原子的位置三者之间存在服从右手定则的关系（见图2-8）。拇指方向就是多余半原子面方向。应当注意，刃型位错的正与负不是绝对的，例如，同一位错，在两位处于对顶位置的观察者看来，正好会是不同的符号。指出这一点，并不意味着刃型位错的正负没有意义，相反，在研究同一晶体中的位错之间的关系等问题时，必须用同一个标准确定位错的符号。

既然刃型位错不一定是直线，刃型位错的一般形状就可能是一条平面曲线，因为平面曲线与其面法线是垂直的，面法线就是$\vec{b}$方向。这种位错有一专门名称叫棱柱位错。

刃型位错的运动方式有两种，一种是滑移；一种是攀移。滑移是刃型位错沿其滑移面的滑动。图2-9为一个正刃型位错，假使在与其滑移面平行的平面上垂直于位错线（亦即平行于柏格斯矢量）的方向上施加一对切应力，则位错线就能够移动（图2-9）。在切应力作用下，位错线逐步向右运动。待到位错移到晶体右表

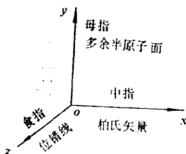


图2-8 刃型位错的多余半原子面、柏氏矢量和位错线三者之间的关系

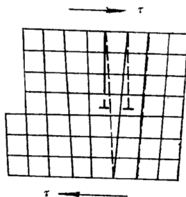
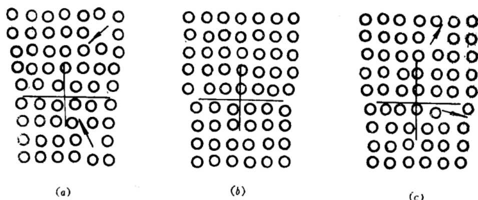


图2-9 刃型位错在切应力作用下的运动

面，则在晶体右侧形成凸出部分，其大小等于柏氏矢量的大小。显然，若外加应力相反，则位错向左移动。在同样的切应力作用下，负刃型位错的运动方向恰好与上述相反。

至于推动位错运动的切应力的来源，则可以有多种。关键是这些来源必须能够产生上述要求的切应力。

刃型位错的攀移是其多余半原子面的周界即位错线上的原子通过扩散而离去，或者位错外的原子通过扩散到达位错线上。两种过程的结果，相应于位错在多余半原子面内的升或降。对于一个棱柱位错环来说，则相当于环的缩小或扩大及移动位置或改变形状。图2-10示意地说明位错的攀移。与滑移相比，攀移因为要求原子和空位的扩散，所以相当困难。实际上攀移只在较高温度时才明显。此外，作用于多余半原子面法线方向上的应力对攀移也



（*a*）正攀移；（*b*）未攀移；（*c*）负攀移

图2-10 刃型位错的攀移运动

有影响，拉应力有利于在位错线上迁来原子迁走空位，压应力有利于在位错线上迁走原子迁来空位。有时候称位错的攀移运动为非保守运动，滑移运动为保守运动。

四、螺型位错及其运动

刃型位错的几何特征比较简单，螺型位错的几何特征比较复

杂。因为螺型位错的基本特点是其柏氏矢量与位错线平行，所以螺型位错没有多余半原子面，而且螺型位错只能是直线状的。

图2-11的螺型位错表明，由于晶体中出现了一个螺型位错，整个晶体变成了以位错线为轴的一连串螺旋面，而不再是一层层的平面。而且这是一个右螺旋。其平面投影见图2-12。定义它为右螺型位错。相应地，图2-13中的位错是左螺旋位错。螺型位错的左或右是绝对的，因为左螺旋与右螺旋是不依观察者的位置变化的。

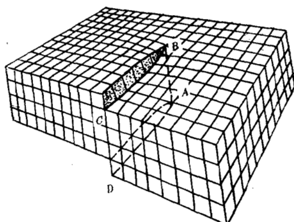


图2-11　简单立方晶体中的右螺型位错（空间）

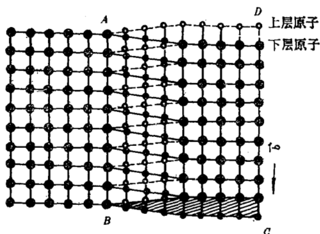


图2-12　简单立方晶体中的右螺型位错(平面)

至于螺型位错的运动，也有两种方式，一种也是滑移，另一种是交滑移。首先研究滑移。图2-14所示为一右螺型位错。图中

的小圆圈代表滑移面以下的原子，小黑点代表滑移面以上的原子。当施加切应力于纸面上下两部分（设纸面以上的切应力向上方，纸面以下的切应力向下方），由于大多数原子处于正常位置，它们将不发生移动；但处于位错线附近的原子，则在很小切应力作用下便会发生塑性移动。理由是它们只占晶体平面上原子的一小部分，而且其中又有一部分已经有了自发趋向下一个位置的趋势。这种移动的结果，是右螺型位错逐渐移到晶体左部，直至滑出晶体。

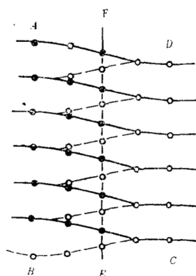


图2-13　简单立方晶体中的左螺型位错（平面）

作为概括，把刃型位错和螺型位错的滑移特征示意地画在图2-15中。

螺型位错没有多余半原子面，谈不上有攀移运动。但是因为

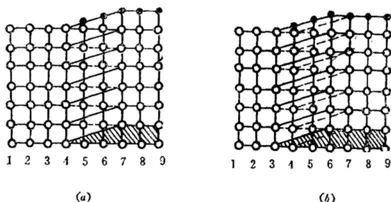


图2-14　螺型位错的滑移运动

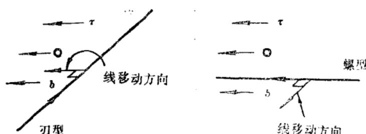


图2-15　刃型、螺型位错滑移要素

螺型位错线与其柏氏矢量平行，却带来了它所特有的一种运动方式，即交滑移。图2-16表示的是螺型位错的滑移，它在图中切应力作用下向左运动。此时的滑移面是 $ABCD$。但是，作为一个螺旋原子面，与$ABCD$同类的面是很多的，只要外加切应力合适，别的面也可以起滑移面的作用。例如，当图中的切应力消失，而

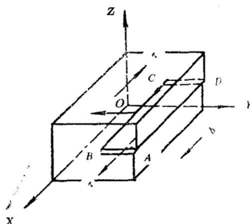


图2-16　右螺型位错在切应力作用下滑移

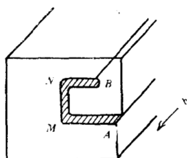


图2-17　螺型位错在多个面上滑移

在左右侧面上出现切应力时，此螺型位错便能产生图2-17中的自 M到N的滑移。当切应力再改变回到上下底面上时，还可以发生NB的滑移。因此，螺型位错在理论上可在平行于其柏格斯矢量的任意平面上滑移，并在垂直于位错线的平面上留下任意曲线状的滑移痕迹。当然。实际晶体中的滑移面数目是有限的，因此它只能

在有限的几个面上滑移。这种从一个面上的滑移转到另一个面上的滑移叫交滑移。

从刃型位错和螺型位错的滑移可以看出，位错的滑移方向总是与其位错线垂直的。

五、位错密度

定义单位体积的晶体中所包含的位错线的长度为位错密度ρ，用式子表示

$$\rho = L/V$$

式中，L 为体积V 中的位错线的总长度，故位错密度 ρ 的量纲为[长度/长度^3]或[长度$^{-2}$]，如cm^{-2}。

在许多情形中，可以把位错线看成是直线，而且是平行地从晶体的一面穿透到其对面，于是位错密度就变成在垂直于位错线的单位面积中位错线与表面的交点数目了，即

$$\rho = \frac{L}{V} = \frac{n\times l}{s\times l} = \frac{n}{s} \qquad (2\text{-}1)$$

式中，l 为晶体从一侧面到另一侧面的长度，n 是 S 面积中所见到位错线的露头数（与表面的交点数目）。当然，这是较不精确的。

晶体中的位错密度可以用物理方法测定。在一般经过良好退火的金属晶体中，位错密度约$10^5 cm^{-2}$，在剧烈冷加工过的金属晶体中，位错密度可增至$10^{12} cm^{-2}$。测定高密度的位错是一件相当困难的工作。

§2 弹性力学基础知识

对位错的几何和运动特点已作了一定的说明，但为了进一步

地了解位错，必须对位错的许多性质加以定量研究。可是因为晶体是各向异性的，计算起来困难很大，所以不但位错理论发展的初期阶段，就是现在，多数的计算工作仍然是把晶体中的位错简化成为弹性体中的位错对待。不过，实际证明，除去位错核心部分以外，这种简化是符合客观情况的。为了计算弹性体中的位错问题，就要运用弹性力学的方法，因此有必要介绍一些弹性力学的基础知识，以帮助缺乏这方面知识的读者加深理解。下面谈的只是所谓线性弹性力学问题。

弹性力学或弹性理论是研究弹性体在力作用下发生的应力、应变问题的。弹性理论中一般都作如下的基本假设：（1）研究的物体是完全弹性的，即外力除去后，物体能完全恢复原状，而且认为应力与应变呈线性关系即遵守虎克定律；（2）不考虑物体的分子、原子结构，而认为它是质地均匀的，并且在整个体积内连续分布，这就意味着物体中取出的微小部分具有与其它部分相同的性质；（3）物体是各向同性的。

一、应力张量

试考查一个弹性体在直角坐标系中的情况（见图2-18）。它在外力作用下处于平衡状态。取出其中M点附近的一小块平行六面体并放大（见图2-19）。图中已画出微体积的应力状态。在平衡条件下，不考虑体力时，对这些应

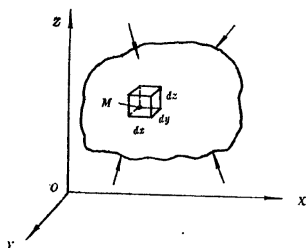


图2-18 处于直角坐标系中的平衡弹性体

力进行计算，能够得到如下平衡方程式（应力是坐标函数，从一个面过渡到另一个面应力有变化，按照台劳级数展开，略去高次项，就能算出）：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z}=0 \\
&\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z}=0 \\
&\frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x}+\frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y}+\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}=0
\end{aligned}
\qquad (2\text{-}2)
$$

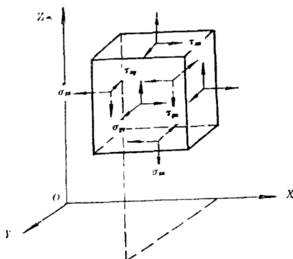


图2-19　无限小体积中的应力分布

在弹性力学中，为表达方便，往往使用σ_{xy}代替τ_{xy}，甚至用x_1 x_2、x_3代替x、y、z，这样，应力的平衡方程可以简化成为

$$\sum_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}=0 \qquad (i,j=1,2,3) \qquad (2\text{-}3)$$

根据力偶矩平衡，可知$\tau_{xy}=\tau_{yx}$等，更一般地写成

$$\sigma_{ij}=\sigma_{ji}$$

弹性力学中，把决定一点的应力状态的 9 个应力看成是一个应力

张量；亦即应力张量σ_{ij}由 9 个分量组成，它还是一个对称张量（因为$\sigma_{ij}=\sigma_{ji}$）。

二、应变张量

弹性体受力后形状发生变化。例如上述微体积六面体受力后就会发生变形，变形的种类也有两种，一种是边长伸长或缩短；另一种是其面由矩形变为平行四边形。正应变表示前一种变形的程度，用ε_{xx}等表示。切应变表示第二种变形的程度，用ε_{xy}等表示，有时也写成γ_{xy}等。这两种应变分别定义如下：

在图2-20中画出了微六面体的一个面$ABCD$，它经变形后成

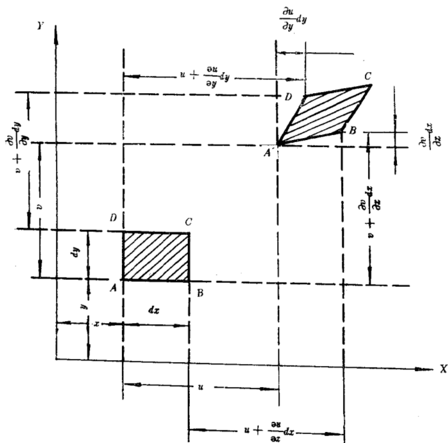


图2-20　微六面体的一个面
正方形$ABCD$，菱形$A'B'C'D'$

为$A'B'C'D'$。首先研究线段AB，变形后A沿x轴发生位移u，B点的位移则是$u+(\partial u/\partial x)dx$。其余各点也可用同样分析写出其位移。由正应变的定义，

$$\varepsilon_{xx}=\frac{A'E-AB}{AB}$$

而

$$A'E=\left[\left(u+\frac{\partial u}{\partial x}dx\right)+dx\right]-u$$

$$AB=dx$$

故

$$\varepsilon_{xx}=\frac{\partial u}{\partial x}$$

由切应变的定义

$$\varepsilon_{xy}=\frac{1}{2}(\alpha+\beta)$$

在小变形的情况下，$\alpha\approx\tan\alpha$，$\beta\approx\tan\beta$，而且

$$\tan\alpha=\frac{(\partial u/\partial y)dy}{dy(1+\varepsilon_{yy})}=\frac{(\partial u/\partial y)}{1+\varepsilon_{yy}}$$

$$\tan\beta=\frac{(\partial v/\partial x)dx}{dx(1+\varepsilon_{xx})}=\frac{(\partial v/\partial x)}{1+\varepsilon_{xx}}$$

在小变形时$\varepsilon_{xx}\ll1$，$\varepsilon_{yy}\ll1$，所以

$$\varepsilon_{xy}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right),\left(=\frac{1}{2}\gamma_{xy}\right)$$

于是就可用同样分析方法得出所有应变：

$$\varepsilon_{xx}=\partial u/\partial x,\quad \gamma_{xy}=(\partial v/\partial x)+(\partial u/\partial y)=\gamma_{yx}$$

$$\varepsilon_{yy}=\partial v/\partial y,\quad \gamma_{yz}=(\partial w/\partial y)+(\partial v/\partial z)=\gamma_{zy}$$

$$\varepsilon_{zz}=\partial w/\partial z,\quad \gamma_{zx}=(\partial u/\partial z)+(\partial w/\partial x)=\gamma_{xz}$$

应变也可简写成张量形式：ε_{ij}。对这些式子进行微分处理，得到所谓的应变连续方程式（相容条件）：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2\varepsilon_{xx}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varepsilon_{yy}}{\partial x^2}=\frac{\partial^2\gamma_{xy}}{\partial x\partial y}\\
&\frac{\partial^2\varepsilon_{yy}}{\partial^2 z^2}+\frac{\partial^2\varepsilon_{zz}}{\partial y^2}=\frac{\partial^2\gamma_{yz}}{\partial y\partial z}\\
&\frac{\partial^2\varepsilon_{zz}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varepsilon_{xx}}{\partial z^2}=\frac{\partial^2\gamma_{zx}}{\partial z\partial x}\\
&\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\gamma_{yz}}{\partial x}+\frac{\partial\gamma_{zx}}{\partial y}-\frac{\partial\gamma_{xy}}{\partial z}\right)=2\frac{\partial^2\varepsilon_{zz}}{\partial x\partial y}\\
&\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\gamma_{zx}}{\partial y}+\frac{\partial\gamma_{xy}}{\partial z}-\frac{\partial\gamma_{yz}}{\partial x}\right)=2\frac{\partial^2\varepsilon_{xx}}{\partial y\partial z}\\
&\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\gamma_{xy}}{\partial z}+\frac{\partial\gamma_{yz}}{\partial x}-\frac{\partial\gamma_{zx}}{\partial y}\right)=2\frac{\partial^2\varepsilon_{yy}}{\partial z\partial x}
\end{aligned}\qquad(2\text{-}4)$$

这些方程式中的x、y、z都是循环的，实际上并不复杂。

三、应力与应变关系（广义虎克定律）

式 $\varepsilon_{xx}=\frac{1}{E}[\sigma_{xx}-\nu(\sigma_{yy}+\sigma_{zz})]$以及 $\gamma_{xy}=\frac{1}{\mu}\tau_{xy}$等在材料力学中就熟悉了。式中的$\mu=G$，即切变模量。写成另一种形式，有

$$\sigma_{xx}=2G\varepsilon_{xx}+\lambda\delta,\quad \tau_{xy}=G\gamma_{xy}\qquad(2\text{-}5)$$

式中，$\lambda=2G\nu/(1-2\nu)$，$\delta=\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}$。

简写成

$$\sigma_{ij}=2Ge_{ij}+\lambda\delta_{ij}\delta\qquad(2\text{-}6)$$

其中

$$\delta_{ij}=\begin{cases}1 & (i=j)\\0 & (i\neq j)\end{cases}$$

$$e_{ij}=\begin{cases}\varepsilon_{ij} & (i=j)\\\frac{1}{2}\varepsilon_{ij} & (i\neq j)\end{cases}$$

把应力平衡方程中的σ_{ij}用e_{ij}代替，再转化为位移，就能得到位移满足的平衡方程

$$G\sum_j\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}+\frac{G}{(1-2\nu)}\sum_j\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i\partial x_j}=0$$

或简写成

$$G\nabla^2\vec{u}+\frac{G}{(1-2\nu)}\text{grad div}\vec{u}=0 \qquad (2\text{-}7)$$

式中，$\vec{u}$代表位移矢量，u_i代表位移分量，即前述u、v、w。

四、弹性力学平衡问题的求解方法

我们已经求出应力平衡微分方程三个，应变连续方程和虎克定律方程各六个。其中有六个应力分量、六个应变分量和三个位移分量是未知量，方程数与未知数相等，理论上只要给定边界条件和初始条件即可求解。实际上具体问题往往很难解。求解方法有应力法或位移法。在解析解困难时，常用近似解，如差分法，有限元法等。

对于平面应变问题，即变形只发生在二维的情况，求解可以简单些。设$u_z=0$，$\frac{\partial u_y}{\partial z}=\frac{\partial u_x}{\partial z}=0$，根据虎克定律，可求出

$$\tau_{xz}=\tau_{yz}=0$$

$$\sigma_{zz}=\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})$$

在这种情况下，弹性平衡方程简化为

$$\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{xy}}{\partial y}=0$$

$$\frac{\partial\tau_{xy}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y}=0$$

由应变连续方程得到

$$\frac{\partial^2\varepsilon_{xx}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varepsilon_{yy}}{\partial x^2}=\frac{\partial^2\gamma_{xy}}{\partial x\partial y}$$

再利用平面虎克定律就可以得到

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=\nabla^2(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=0 \qquad (2\text{-}8)$$

设有应力函数ϕ，它具有性质：

$$\sigma_{xx}=\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2},\quad \sigma_{yy}=\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2},\quad \tau_{xy}=-\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y} \qquad (2\text{-}9)$$

则这些应力能够满足平衡微分方程，并且当代入$\nabla^2(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=0$以后得到双调和方程

$$\nabla^4\phi=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\phi=0 \qquad (2\text{-}10)$$

这样，如能求得满足边界条件而又满足双调和方程的应力函数ϕ，平面应变问题就容易求解了。

§3 位错的应力场

既然位错是晶体中的一种缺陷，它的存在一定会引起其周围的原子排列的畸变，也会在晶体中引起应力。对位错应力场进行分析和计算，是位错的数学和力学理论的基础。

一、直线形刃型位错的应力场

图2-21示意地表现由晶体模型演变成弹性体模型的刃型位错情况。用下述方法构成这个位错：在尺寸很大的圆柱体中心挖出一个半径为r_0的小洞；然后沿xoz平面从外部切通至中心；在切开的两面上加外力，使其沿x轴作相对位移b；再把切开面胶合

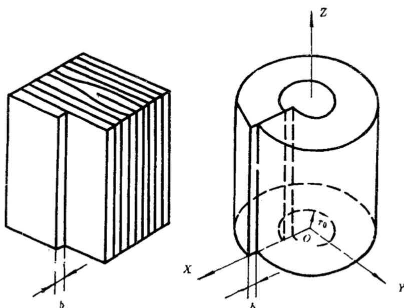


图2-21 刃型位错的晶体模型与弹性体模型

起来，撤去外力。这样的圆柱体就与包含着一个刃型位错的晶体相似了。位错线沿着z轴方向。从弹性力学角度看，这种情形相当于一个平面应变问题，因为位移的z轴分量$u_z=0$。所以可以用图2-22的平面模型讨论刃型位错的应力场。

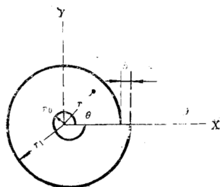


图2-22 直线型刃型位错的弹性平面模型

我们使用应力函数法来求解。设应力函数为ϕ。在直角坐标系中的双调和方程是

$$\nabla^4\phi=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^2\phi=0$$

在极坐标系中的双调和方程是

$$\nabla^4\phi=\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)\phi=0 \quad (2\text{-}11)$$

满足$\nabla^4\phi=0$的应力函数，在直刃型位错中也可以用通常的分离变量法求出，然后结合位错的具体条件最后确定。现简介如下。

象直刃型位错这类问题，使用极坐标比较方便。设应力函数ϕ具有下面的形式：

$$\phi=f(r)g(\theta)$$

这里$f(r)$是r的函数，$g(\theta)$是θ的函数。进一步，设$g(\theta)=\sin\theta$。有什么根据呢？我们把构成位错时的动作看成是切开面的一边固定，另一边受到径向力弯曲的情况，则任一截面上的弯矩与$\sin\theta$成正比，而且正应力$\sigma_{\theta\theta}$又与弯矩成比例。但因$\sigma_{\theta\theta}=\partial^2\phi/\partial r^2$，所以应力函数$\phi$应当与$\sin\theta$成比例，即$\phi$中含有$\sin\theta$，于是

$$\phi=f(r)\sin\theta$$

把它代入极坐标的双调和方程，可得到常微分方程：

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{1}{r^2}\right)^2 f(r)=0 \quad (2\text{-}12)$$

此方程展开后成为欧拉方程，即

$$\frac{d^4f}{dr^4}+\frac{2}{r}\frac{d^3f}{dr^3}-\frac{3}{r^2}\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{3}{r^3}\frac{df}{dr}-\frac{3}{r^4}f=0$$

设$r=e^t$，代入上式，成为

$$\frac{d^4f}{dt^4}-4\frac{d^3f}{dt^3}+2\frac{d^2f}{dt^2}+4\frac{df}{dt}-3f=0$$

这是一个常系数线性微分方程，其特征方程为

$$m^4-4m^3+2m^2+4m-3=0$$

所以

$$f(r)=Dr^3+Cr^{-1}+Br+Ar\ln r$$

一般来说，由于弹性理论处理晶体中的位错问题本身就是近似的，所以通常仅取$f(r)=Ar\ln r$一项，这样，应力函数

$$\phi=Ar\ln r\cdot\sin\theta$$

从应力函数ϕ与应力间关系式(2-9)很容易求出诸应力：

$$\left.\begin{aligned}
&\sigma_{rr}=\frac{A}{r}\sin\theta \qquad &&\sigma_{xx}=A\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}\\
&\sigma_{\theta\theta}=\frac{A}{r}\sin\theta \qquad &&\sigma_{yy}=A\frac{y(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}\\
&\tau_{r\theta}=-\frac{A}{r}\cos\theta \qquad &&\tau_{xy}=A\frac{x(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}\\
&\sigma_{zz}=\nu(\sigma_{rr}+\sigma_{\theta\theta}) \qquad &&\sigma_{zz}=\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})
\end{aligned}\right\} \quad (2\text{-}13)$$

利用虎克定律求出应变量ε_{xx}和ε_{yy}。再应用$\varepsilon_{xx}=\frac{\partial u_x}{\partial x}$和$\varepsilon_{yy}=\frac{\partial u_y}{\partial y}$积分以后就可求出位移$u_x$和$u_y$：

$$u_x=-\frac{A}{\mu}\left[(1-\nu)\theta+\frac{\sin2\theta}{4}\right]$$

$$u_y=\frac{A}{\mu}\left[\frac{1-2\nu}{2}\ln r+\frac{\cos2\theta}{4}\right] \qquad (2\text{-}14)$$

根据位错条件

$$(u_x)_{\theta=2\pi}-(u_x)_{\theta=0}=b$$

定出常数

$$A = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$$

把所得的应力场结果用图形表示，则如图2-23所示。从应力表达式和图就可以看出，在同一地点，$|\sigma_{xx}|$比$|\sigma_{yy}|$要大，这是因为刃型位错的形成实际上是垂直于x轴插入了半片原子面，因而在x轴方向上产生较大的应力。在$y>0$的区域，σ_{xx}是负值，即是压应力；在$y<0$的区域，σ_{xx}是正值，即是拉应力。这也和插入多余半原子面有关，插入半原子面使得下半部的原子距离受到伸张，而上半部的原子被下半部反挤压而受压缩。

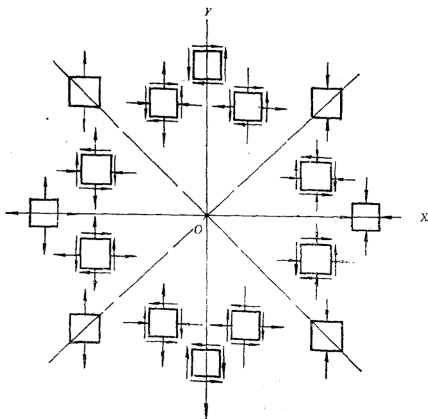


图2-23　直刃型位错的应力场

把直角座标系中的诸应力分量σ_{xx}等表达成$f(\theta)/r$的形式，即

$$\sigma_{xx}=A\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}=A\frac{\sin\theta(2+\cos2\theta)}{r}$$

$$\sigma_{yy}=-A\frac{\sin\theta\cos2\theta}{r}$$

$$\tau_{xy}=-A\frac{\cos\theta\cos2\theta}{r} \qquad (2\text{-}15)$$

我们把这些应力形象地表示出来，就是图2-24。图中 的 单 位 是

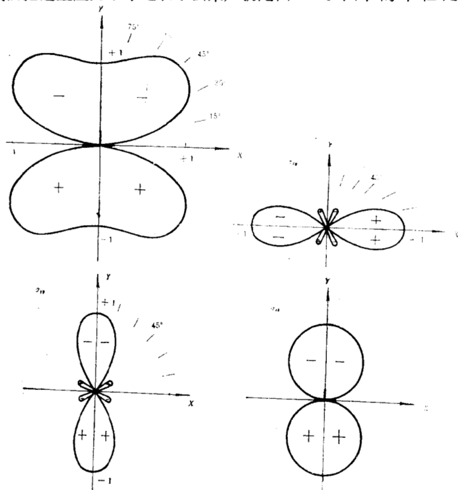


图2-24　刃型位错的应力σ_{xx}，σ_{yy}，σ_{xy}和σ_{zz}分量图

$Gb/2\pi(1-\nu)$，应力值为$r\sigma_{ij}$。此图是一个极坐标图，变量为θ。对于塑性变形最有关系的切应力τ_{xy}的极大值在滑移面上（即$y=0$处）。

从位移的表达式中可以求出体膨胀率δ：

$$\delta=\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}=\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}$$

$$=-\frac{b}{2\pi}\times\frac{1-2\nu}{1-\nu}\times\frac{\sin\theta}{r} \tag{2-16}$$

从式中可以看到在$0°<\theta<180°$的范围内，δ是负值，在$180°<\theta<360°$范围内，δ是正值。从整体上来说，介质的平均密度仍与完整无位错相同；至于局部，则有的区域产生收缩，有的区域产生膨胀，只有沿x轴处的体积不变。体积变化随离位错的距离增大而呈反比地减小。

二、螺型位错的应力场

螺型位错的模型如图2-25所示。这也是沿xoz平面剖开空心圆柱体，但相对位移却沿z轴进行，然后再胶合而得的。

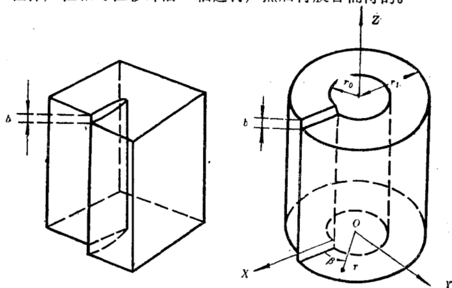


图2-25　螺型位错的晶体与弹性体模型

在这里，位移的分量u_x和u_y均为零。只有z分量u_z不等于零，但也不沿 z 轴发生变化。应力只有τ_{yz}与τ_{xz}不为零。因为$u_x = u_y = 0$，所以

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \frac{\partial u_x}{\partial y} = \frac{\partial u_x}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial x} = \frac{\partial u_y}{\partial y} = \frac{\partial u_y}{\partial z} = 0$$

既然u_z不随z而变，所以

$$\frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

但是$\partial u_z/\partial_x$与$\partial u_z/\partial_y$却不为零，于是

$$\gamma_{xz} = \frac{\partial u_z}{\partial x} \qquad \gamma_{yz} = \frac{\partial u_z}{\partial y}$$

切应力成为

$$\tau_{xz} = G\frac{\partial u_z}{\partial x}, \qquad \tau_{yz} = G\frac{\partial u_z}{\partial y}$$

应力平衡方程只剩下

$$\frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} = 0$$

把两个切应力代进去，得到

$$G\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}\right) = 0$$

即

$$\nabla^2 u_2 = 0 \tag{2-17}$$

由于位移u_z应当满足位错的条件

$$(u_z)_{\theta=2\pi} - (u_z)_{\theta=0} = b$$

最简单的解可以取为

$$u_z = \frac{b}{2\pi}\theta = \frac{b}{2\pi}\text{arctg}\frac{y}{x}$$

从而得到

$$\tau_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2} \quad \tau_{yz} = \frac{Gb}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2} \quad (2\text{-}18)$$

如果使用散度概念，因为螺型位错的构成过程中所发生的变形并不引起体积变化，所以

$$\text{div}\vec{u} = 0$$

这样，位移的平衡方程就简化成为

$$G\nabla^2\vec{u} + (\lambda + G)\text{grad div}\vec{u} = G\nabla^2\vec{u} = 0$$

再考虑u_x、u_y等于零，所以很快得到$\nabla^2 u_z = 0$

对圆柱坐标，应力$\tau_{\theta z}$为

$$\tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r}$$

是由切应变

$$\gamma_{\theta z} = b/2\pi r$$

所引起。

对于螺型位错，也可以画出刃型位错那样的表示应力的极坐标图，形象地表示沿位错周围的应力变化情况。

无论刃型和螺型位错，前面求出的应力表达式，都是有具体条件的，即是在一定的坐标系中的具体表达式，不是随便什么条件下都是这样。例如，前面求出的位错的应力场指的是位错线沿 z 轴的位错应力场。

另外，容易看出，应力值在位错线附近比在位错远处要大，当 r 值趋近于零时，应力趋向无穷大。这显然不合实际，因为实

际上晶体中存在位错并不引起太大的应力。这正是弹性理论的局限性以及要挖空圆柱体的原因。

三、任意形状位错环的应力场简介

任意形状位错的应力场的计算很复杂，这里仅作概念性介绍。

考虑图 2-26 中原点附近有一个柏氏矢量为$\vec{b}$、法线矢量为$\vec{n}$、面积为dA 的微位错环。可以按下述步骤构成此位错：在弹性介质中挖出面积为dA、厚度为h的体积 T。然后把T变形，上表面（沿$\vec{n}$的正方向）相对于下表面做相对位移$-\vec{b}$，这样，T 区域内有均匀应变

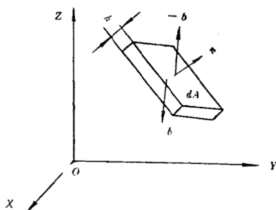


图2-26　任意取向的微位错环

$$e_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)=-\frac{1}{2h}(b_in_j+b_jn_i)$$

再把介质中空洞的两壁作等同的相对位移，使整个介质发生弹性应变，再把介质T塞进去，并胶合起来。令$h\to 0$，在区域界面上的应力，按照虎克定律为

$$\sigma_{ij}=\sum\lambda e_{kk}\delta_{ij}+2Ge_{ij}$$

这样，在上下表面的作用力正好是数值相等方向相反的一对偶力。

从弹性力学还可以算出作用于源点的力分量F_j，在场点的位移分量u_i可表示为

$$u_i = U_{ij}F_j$$

$$U_{ij} = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)}\left[\delta_{ij}\cdot\frac{3-4\nu}{\rho} + \frac{\rho_i\rho_j}{\rho^3}\right]$$

$$\rho_i = x_i - x_i'$$

$$\rho = +\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}$$

这里的U_{ij}表示源点在j方向单位作用力在场点产生的位移i方向的分量，文献中称为格林张量函数。考虑到偶力的效应，用台劳级数展开，保存一次项，即可得

$$u_i = -\sum_k h\sigma_{kl}\frac{\partial U_{il}}{\partial x_k}dA$$

将σ_{ij}及U_{ij}代入上式，并利用λ、μ、ν之间的关系，可得

$$u_i = \frac{k_0}{\rho^2}\left\{\frac{1-2\nu}{\rho}\sum[n_ib_k\rho_k + b_in_k\rho_k - \rho_ib_kn_k]\right.$$

$$\left.+\sum_l\sum_k\frac{3\rho_ib_k\rho_kn_l\rho_l}{\rho^3}\right\}dA \qquad (2\text{-}19)$$

结果中与h无关，即代表一无限小的微位错环（面积dA，而法线$\vec{n}$及柏氏矢量$\vec{b}$）的位移场。对上式微分，再利用虎克定律，就可以求出微位错环的应力场。由于式子较繁，不再列出。可以看出，位移随距离作$1/\rho^2$的减小，应力则作$1/\rho^3$减小。

试取棱柱位错环这种特例，设环处于坐标原点，而且环沿xoy平面，即$n_1 = n_2 = 0$，$n_3 = 1$，$b_1 = b_2 = 0$，$b_3 = b$（见图2-27），则位移

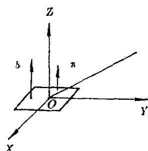


图2-27　微棱柱环示意图

$$
\left.\begin{aligned}
n_x &= \frac{Kx}{6r^3}\left[-(1-2\nu)+\frac{3z^2}{r^2}\right] \\
u_y &= \frac{Ky}{6r^3}\left[-(1-2\nu)+\frac{3z^2}{r^2}\right] \\
u_z &= \frac{Kz}{6r^3}\left[1-2\nu+\frac{3z^2}{r^2}\right]
\end{aligned}\right\} \qquad (2\text{-}20)
$$

式中

$$
K = -\frac{3b}{4\pi(1-\nu)}\delta A
$$

对于滑移位错环，可根 据 图2-28，$n_1 = n_2 = 0$，$n_3 = 1$，$b_1 = b$，$b_2 = b_3 = 0$。则

$$
\left.\begin{aligned}
u_x &= \frac{K'z}{6r^3}\left[1-2\nu+\frac{3x^2}{r^2}\right] \\
u_y &= \frac{K'3xyz}{6r^5} \\
u_z &= \frac{K'x}{6r^3}\left[1-2\nu+\frac{3z^2}{r^2}\right]
\end{aligned}\right\} \qquad (2\text{-}21)
$$

式中，$K' = -36\delta A/[4\pi(1-\nu)]$。

对任意形状的有限位错环，可通过划分为许多网格，每个网格视为一个微位错环处理，并用面积分求解，理论上就得到解决。具体求解成了一个数学问题。

有限位错环附近，应力随到位错线的距离ρ作$1/\rho$变化，和直线形位错 相 似；但 在 远处，则随$1/\rho^3$而减小，和微位错环相似。

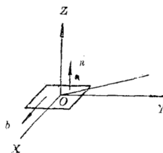


图2-28 微滑移位错环示意图

四、各向异性弹性体中的直线位错

位错理论中采用各向同性简化，使数学处理简单，这样作之所以有益，还由于其它的理论近似和实验误差甚至比各向同性简化还严重。但由于透射电镜和计算技术的发展，采用更接近实际的模型的可能性是大为增加了。在考虑更接近实际的计算工作中，首先是考虑各向异性和非线弹性效应。这方面的计算更加繁复，这里只介绍一点结论。

只有当位错线平行于晶体的少数对称轴时，无限长的直线位错的应力场方才可用解析形式表示。例如，一个螺型位错平行于一个二重轴，并和另一个二重轴垂直，这对于(110)位错来说，x轴为[$\bar{1}$10]，y轴为[001]，其位移场可以表示为

$$u_z = \frac{b}{2\pi}\text{arctg}(\text{tg}\theta/A^{1/2})$$

这里的$A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12})$，是各向异性参量，其中$c_{11}$等是立方系的弹性常数。当$A\to1$时，就是各向同性情况。又如一个螺型位错平行于三重轴，并和另一个二重轴相垂直，即对一个‹111›位错，x轴为[11$\bar{2}$]，y轴为[$\bar{1}$10]，它的位移

$$u_z = \frac{b}{6\pi}\text{arctg}[\text{tg}3\theta/(1-\delta)^{1/2}]$$

这里的δ是另一个各向异性参量，$\delta = s_{15}/s_{44}s_{11}$，其中$s_{11}$等是弹性顺度。$\delta\to0$，为各向同性极限。表2-1列出了一些金属的各向异性参量值，可见钨的弹性性质接近于各向同性，而锂则表现出强烈的各向异性。

各向异性的位错弹性理论不仅在数量和各向同性理论有差别，在某些问题上还表现出性质上的不同。例如螺型位错的膨胀，各向同性时为零；但在各向异性时，沿二重轴和四重轴虽也如此，可是沿三重轴‹111›时却有一个有限的膨胀

表2-1　一些材料的各向异性参量

材　　料	A	δ
Li(195K)	8.73	0.52
Fe	2.40	0.11
W	1.00	0.00
Cu	3.20	0.20
Al	1.01	0.01

$$\Delta \propto \frac{b\delta \sin 3\theta}{2\pi r(1-\delta)^{1/2}(1-\delta\cos^{2}3\theta)}$$

图2-29是Li中沿[111]的螺型位错的膨胀场。可以看出，螺型位错对晶体原有三重对称性没有影响。在各向异性的晶体中，刃型位错的膨胀场示于图2-30。

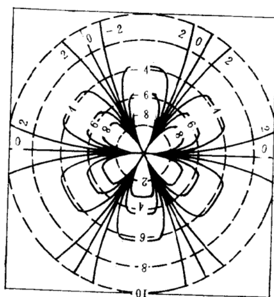


图2-29　Li中沿[111]的螺型位错的膨胀场

在位错线附近，严重的畸变使线性弹性理论不再适用，但因这里连续介质模型本身就不合理，应该用原子结构模型来研究，所以非线性弹性理论也不是彻底解决

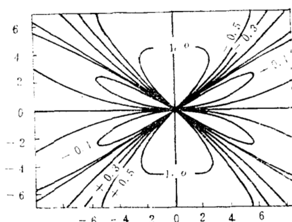


图2-30　在各向异性介质中刃型位错的膨胀场

问题的方法。但非线性弹性理论也能指出一些线性弹性的缺点，如位错大量存在导致晶体密度下降，线弹性理论却算出位错引起的膨胀率平均为零。

§4　位错的弹性能、自由能及线张力

一、弹性能

既然位错在周围产生应变区域，也就在其中储存了应变能。总的应变能可以分成两部分

$$u_t = u_c + u_e$$

式中，u_t为总能量，u_c为位错中心区域的能量，u_e为周围的能量。

先讨论u_e。根据应变能密度来进行积分，即可计算应变能，但直接计算形成位错所做的功要更简便一些，这个功就是储存的能量。回顾位错形成的过程，以刃型位错为例，是将圆柱体沿xoz面剖开，剖面两边由0至b进行相对位移。现设已经进行了的位移为αb，令α逐渐由0增加至1，是一个分数。为计算单位长度位错线的能量，把剖面分成许多面元，沿面元所加的切力为$\tau'_{\theta r}dr\cdot 1$，$\tau'_{\theta r}$等于柏氏矢量值为$\alpha b$的位错在面元处产生的切应力分量：

$$\tau'_{\theta r}=\tau_{\theta r}\cdot\alpha=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{\cos\theta}{r}\cdot\alpha$$

注意到剖开处$\theta=0$，即$\cos\theta=1$，所以上式成为

$$\tau'_{\theta r}=\frac{G\alpha b}{2\pi(1-\nu)}\ \frac{1}{r}$$

在此切应力作用下，面元位移$d(\alpha b)$，所做之功为

$$dW=\int_{r_0}^{r_1}\tau'_{\theta r}d(\alpha b)dr=\int_{r_0}^{r_1}\frac{G\alpha b}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{1}{r}d(\alpha b)dr$$

在位移从0到b的全部过程中，α从0到1，所以总功为

$$W=\int_{r_0}^{r_1}\int_0^1\frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)}\alpha d\alpha\frac{dr}{r}$$

$$=\frac{1}{2}\int_{r_0}^{r_1}\frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)}\ \frac{dr}{r}=\frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{r_1}{r_0}\qquad(2\text{-}22)$$

类似地可以求出螺型位错的能量为

$$W=\int_{r_0}^{r_1}\int_0^1\tau'_{\theta z}bd\alpha dr=\int_{r_0}^{r_1}\int_0^1\frac{Gb^2}{2\pi r}\alpha d\alpha dr$$

$$=\frac{Gb^2}{4\pi}\ln\frac{r_1}{r_0}\qquad(2\text{-}23)$$

由以上二式可知，刃型位错的能量大于螺型位错的，是后者的$1/(1-\nu)$倍。

如果位错是混合型的，位错线与柏格斯矢量之间的夹角为ϕ，它就相当于矢量为$b\cos\phi$的螺型位错与矢量为$b\sin\phi$的刃型位错的叠加。由于螺型位错与刃型位错没有公共的应力分量，它们的能量可以简单相加。这样，ϕ为任意角度的直线位错的单位长度上的能量为

$$u_e=W=\frac{Gb^2}{4\pi K}\ln\frac{r_1}{r_0}\qquad(2\text{-}24)$$

其中 $$\frac{1}{K}=\cos^2\phi+\frac{\sin\phi}{1-\nu},$$

K值变化于1与$(1-\nu)$之间。

从位错应变能公式可知，如果r_1增大或r_0减小，都会导致应变能增大。当然，实际上不会很大，这是因为公式中的r_0不适用于位错心部，即r_0不能过小；另外，r_1在真实晶体中也不会超越亚晶粒大小。一般退火金属的$r_1\approx 10^{-4}$cm。于是单位长度的位错能量的数量级（当取$r_0\approx 10^{-7}$cm时）为

$$u_e\approx\alpha Gb^2$$

式中，$\alpha=0.5\sim 1$。

如果取$G=4\times 10^6 \mathrm{N/cm^2}$，$b=2.5\times 10^{-8}$cm，则单位长度的位错的能量约为$2.5\times 10^{-9}$J/m，或约4eV/(每原子面距离)。

至于位错中心部分的能量，不同的计算结果不完全一致，但总的说来所占比例不是很大，约为总应变能的0.1左右。

从应变能的表达式中看到的一个最主要的事实是位错的能量与其柏氏矢量的平方成正比。这一点是今后研究许多问题时常用到的，从而也进一步说明了柏氏矢量对位错所具有的重要意义。

二、自由能

上面所计算出的应变能，是单位长度的位错线的应变能。因此，位错的总能量与其长度成正比。另一方面，位错的存在使晶体的无序度和熵增加，都使自由能降低。组态熵的存在是由于位错能够在晶体中作各种各样的布局。位错也会影响晶体的热振动。

一根直的位错线能够坐落得沿着任何一排与它平行的原子。如果垂直于这根线的面积是A，位错所能够坐落的位置数目就是$n\approx A/a^2$，其中a是原子间距。应用玻尔兹曼的熵的公式$k\log n$，沿着位错的每个原子面长度在温度T时对于自由能的贡献便是

$$-(a/L)KT\log(A/a^2)$$

其中的k是玻耳兹曼常数，L是位错的长度，如果取$L=1\text{cm}$，$A=1\text{cm}^2$，自由能降低约为$10^{-6}kT$，因而是可以忽略的（在室温下，$kT\approx 1/40\text{eV}$），远比应变能小。

如果认为位错线是可弯的，组态熵便可能较高一些，因为这时位错线能够在晶体中以不同的形状存在，从而使排列的数目增多。为了估计这个贡献的上限，假想位错线是完全可弯的，这样，在位错线所通过的每个原子面内，位错线的路程便可以偏离到$z(\approx 6)$个邻近的原子座位上去。这对于每个原子面的自由能的贡献是

$$-kT\log z$$

并且是小于$2kT$ 的。这也远比应变能为小；何况它一定是被估计得过高了的，因为位错线绝不是完全可弯的。

为了估计位错影响晶体热振动所引起的自由能变化，柯垂耳、弗里埃德尔和弗兰克等都进行过分析，结果大概是位错对于自由能的贡献，从振动熵方面考虑，约为每个原子面上有$1\sim 3kT$，与组态熵一个数量级。

从上面的结果可以看出，熵对自由能的贡献是远小于应变能的贡献的。一直到接近熔点，位错的存在总是使晶体的自由能增加；也就是说，位错的存在使晶体处于热力学上不平衡的状态。在通常温度下不存在位错的平衡密度。近年来严格控制晶体的生长条件，可以获得几乎没有位错的单晶体，也证明了这一点。但一般的单晶体，更不必说多晶材料，单纯依靠退火很难把位错完全消除，这是因为位错虽然在热力学上是不平衡的，但往往排列成力学上平衡的组态（例如网络、亚晶界等）。

三、线张力

从以上的讨论可知，位错就像液体为缩小表面积以求降低能量而产生表面张力一样，也有尽可能缩短其长度以降低能量的倾向，而产生一种称为线张力的组态力。下面，第一步先粗略地证

明有线张力的存在，然后再估算线张力的大小。

如图2-31，设有位错线处于 z 轴上，它所引起的应变只是 x 与y的函数，与z无关。例如p、q两点，它们的x、y坐标相同，只是 z 坐标值不同，显然它们那里的应变是完全相同的。如果此位

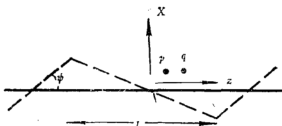


图2-31 说明位错存在线张力的示意图

错由于某种原因而不再是直线，最简单的情况就是变成了一条折线，与 z 轴呈Ψ角(设角很小)。这样，p点和q点与位错线的距离便不再相等，应变也不再相同。这也就是说，位错弯折之后，应变不再只与x、y有关，而且与 z 也有关了。与 z 坐标有关的切应变为

$$\gamma_{xz}=\frac{\partial u_x}{\partial z}\qquad\qquad \gamma_{yz}=\frac{\partial u_y}{\partial z}$$

从图中看到，$\Psi=\partial x/\partial z$，故上式可写成

$$\gamma_{xz}=\psi\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)\qquad\qquad \gamma_{yz}=\psi\left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)$$

根据弹性力学的理论，由于这些应变，使位错的应变能有如下的增加：

$$\frac{1}{2}G(\gamma_{xz}^2+\gamma_{yz}^2)=\frac{1}{2}G\psi^2\left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2\right]$$

其实，$\frac{1}{2}G\,[(\frac{\partial u_x}{\partial x})^2+(\frac{\partial u_y}{\partial x})^2]$实际上和一根直位错线场中的应变能密度相同。因此，近似地说，由于位错从直线弯成 z 字形，使位错的能量密度由1增加至$1+\Psi^2$。Ψ^2一定是正数，表示无论

怎样弯析，总会使能量增加。所以位错总是力图变直，以求降低能量，于是产生了线张力的概念。位错的线张力是一种组态的作用力，不要将它和位错线附近的个别原子所受的作用力混淆起来。

位错的线张力的数值与位错线具体形状有关。因为位错的能量为其应力场中的畸变能的总和，而应力场又取决于位错线的形状。前面已经讨论过的只是直线形位错稍加弯折的情况。由于任意形状的位错线的应力场很难计算，因此，对于线张力也只能求出近似的结果。下面介绍的是弗里埃德尔的估算。

在图2-32中，设有位错线呈浅波浪形，波长为λ，位错线的长度由 l 增加到$l+\Delta l$。由此产生的应变能的增加可分成两部分考虑。在离位错线较远的区域($r>\lambda$)，增加的位错线段的应力场相互抵消，这个区域的应变能与长度为 l 的直位错线的应变能相等，按应变能公式，

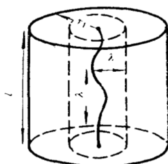


图2-32　正弦形位错的线张力

$$u_1 = l\cdot\frac{Gb^2}{4\pi K}\ln\frac{r_1}{\lambda}$$

在位错线附近的区域($r\leqslant\lambda$)内，位错线的应变能可近似地估计为相当于长度是$l+\Delta l$的直线位错的应变能：

$$u_2 = \frac{Gb^2}{4\pi K}(l+\Delta l)\ln\frac{\lambda}{r_0}$$

设线张力为T，并定义为每增加单位长度位错线所增加的能量，

则
$$T\Delta l = \Delta l\,\frac{Gb^2}{4\pi K}\ln\frac{\lambda}{r_0}$$

故
$$T = \frac{Gb^2}{4\pi K}\ln\frac{\lambda}{r_0}$$

若设(一般情况下)$\lambda \approx 100r_0$，则

$$T \approx Gb^2/2$$

这个数值与位错的应变能同一数量级。

上面的分析说明线张力与所考虑的波纹的波长有关系。而且，即使在各向同性介质中，位错的能量和位错线的取向有关，如螺型位错与刃型位错的能量有差异，就反映了能量与取向的关系。曾经计算出，螺型位错变弯时线张力要比刃型位错变弯时线张力大得多。所以，即使在各向同性介质中，位错的线张力也表现出明显的各向异性。

由于位错有线张力，所以弯曲位错会由线张力产生一个指向曲率中心的向心恢复力。在图2-33中，

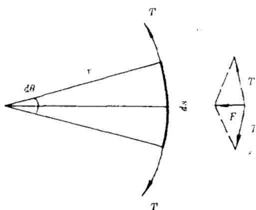


图2-33 弯曲位错的向心恢复力

柏氏矢量 $\vec{b}$ 的一段位错上的微弧为ds，向曲率中心所张开的角度为$d\theta = ds/r$，微弧两端受线张力T的作用，产生指向曲率中心的恢复力fds，f为每单位长度位错的向心恢复力。由图可见

$$2T\sin\frac{d\theta}{2} = fds = F$$

当$d\theta$很小时，利用 $2T\sin(\frac{d\theta}{2}) \approx 2T\ (\frac{d\theta}{2}) = Td\theta$，可得

$$f = \frac{T\,d\theta}{dS} = \frac{T}{r}$$

由式可见，曲率半径r越小，则恢复力越大；要使位错弯曲，外力必须在位错上作用一个能与向心恢复力平衡的力。

§5 位错受力

在一定的外加应力作用下，位错运动并能使晶体发生塑性变形。因此，外力对晶体作了功。也可以说是有一个力作用在位错线上使它移动。但位错是原子排列的一种特殊组态，并不是一个物理实体，所以作用在位错上的力的概念不能简单地理解为真实地有力作用在位错线上，而应当理解为相当于有力作用在位错线上。这一点也许要等到下面讨论后才能完全弄清楚。

一、直线位错受力

设想沿晶体的滑移面和柏氏矢量方向施加切应力 τ，推动长为 L 的刃型位错运动了距离 ds，见图2-34。这种运动使晶体中

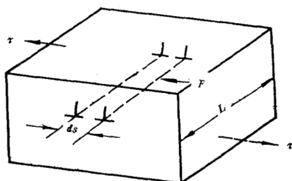


图2-34　刃型位错受力运动

的已滑移区增加 Lds。在这个区域中的两部分晶体产生相对位移 b，因此，切应力所做之功等于

$$dw = \tau bLds$$

这样的功相当于垂直于位错线且沿 ds 方向有一个作用力 F 所做，即

$$dw = Fds$$

两式比较，F应为

$$F=\tau bL$$

那么作用在单位长度的位错线上的力应为

$$f=F/L=\tau b$$

这就是推动单位长度的刃型位错运动之力。由式可见，这个力是很小的。由于同一位错线上的 b 相同，故沿各处的力均有同样大小。此力垂直于位错线。

上述关于作用在位错上的力的定义，对于刃型位错的情况比较直观与自然。但对于我们已经熟悉的螺型位错的运动来说，却有问题。因为螺型位错线运动的方向，并不与外加切应力一致，而是与之垂直（见图2-35），这就要求接受切应力在其垂直方向

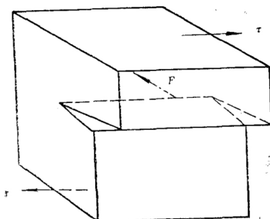


图2-35　螺型位错受力运动

产生推动位错线运动的力的概念，这是常识上难以理解的。因此，只能说明作用在位错上的力或者位错所受的力是一种组态力，即在切应力作用下原子移动的效果相当于有一个垂直于位错线的力推动位错运动。

二、作用在位错上的力的一般公式

皮瞿(Peach)—柯勒(Koehler)提出了一个计算作用在一般位错线上的力的公式。设想位错受到外加应力场或其他晶体缺陷所产生的应力场的作用（见图2-36）。应力场的情况可用应力张量σ来描述。假设位错的线元$d\vec{l}$向任意方向作位移$d\vec{s}$，应力做功dw，则位错线元所受的作用力$d\vec{F}$可按下式定义



图2-36 作用在位错线上的力的导出原理图

$$dw = d\vec{F}\cdot d\vec{s}$$

另外，令$\vec{n}$表示位错所扫过的面元$d\vec{l}\times d\vec{s}$的法线矢量，则通过面元作用的应力矢量可以表示为应力张量σ与$\vec{n}$的并矢量积（即二阶张量与一阶张量—矢量—相乘得到一个矢量）：

$$\vec{T}=\sigma\cdot\vec{n} \tag{2-25}$$

应力矢量$\vec{T}$扫过单位面积所做的功就等于（展开即可证明）

$$\vec{b}\cdot\vec{T}=\vec{b}\cdot(\sigma\cdot\vec{n})=(\vec{b}\cdot\sigma)\cdot\vec{n}$$

因此，扫过面元的功（利用数性三重积的性质）：

$$dw=(\vec{b}\cdot\sigma)\cdot(d\vec{l}\times d\vec{s})=[(\vec{b}\cdot\sigma)\times d\vec{l}]\cdot d\vec{s}$$

将两个表示功的式子作比较，即可看出位错线元所受作用力的一般公式为

$$d\vec{F}=(\vec{b}\cdot\sigma)\times d\vec{l} \tag{2-26}$$

值得注意的是，按照这个公式，位错线所受的力总是与位错线垂

直（因为$d\vec{F}$是$d\vec{l}$与另一矢量叉积的结果）。这样，这个式子就既确定了作用在位错线上的力的大小，又确定了力的方向。当然，这个力仍然是组态力。

把作用在位错上的力的公式用矩阵形式表示时，由于应力张量为

$$\sigma=\begin{pmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz}\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz}\end{pmatrix}$$

柏格斯矢量$\vec{b}$为

$$\vec{b}=(b_x\ \ b_y\ \ b_z)$$

可得（鉴于应力张量的对称性）：

$$\vec{b}\cdot\sigma=(\sigma_{xx}b_x+\sigma_{yx}b_y+\sigma_{zx}b_z)\vec{i}+$$
$$(\sigma_{xy}b_x+\sigma_{yy}b_y+\sigma_{zy}b_z)\vec{j}+(\sigma_{xz}b_x+\sigma_{yz}b_y+\sigma_{zz}b_z)\vec{k}$$

将括弧中的项分别代以A、B和C，则有

$$\vec{b}\cdot\sigma=A\vec{i}+B\vec{j}+C\vec{k}$$

于是

$$d\vec{F}=(A\vec{i}+B\vec{j}+C\vec{k})\times(dl_x\vec{i}+dl_y\vec{j}+dl_z\vec{k})$$
$$=\begin{vmatrix}\vec{i} & \vec{j} & \vec{k}\\ A & B & C\\ dl_x & dl_y & dl_z\end{vmatrix}$$

应当注意，这是线元$d\vec{l}$上所受的力，不是单位长度位错线所受的力。作用在单位长度位错线上的力为

$$\vec{f}=(\vec{b}\cdot\sigma)\times\vec{t} \qquad (2\text{-}27)$$

式中，$\vec{t}$为位错线正方向上的切线方向的单位矢量。这是一个很有用的公式，它在计算位错受力的问题时会经常使用。

§6 位错的萌生和增殖

塑性变形主要依靠位错的运动而发生，塑性变形又是位错滑出晶体的过程。因此就要回答位错最先是怎样产生的（这就是位错的萌生问题）。还要回答产生大量塑性变形的位错从何而来的问题，这个问题由于塑性变形后的晶体中的位错往往不是减少而是更多显得更为突出（这就是位错的增殖问题）。

一、位错的萌生

对于晶体中最初的位错的来源问题，目前仍然不能说已经研究得很清楚。事实是，除去精心制造的细小晶体外，几乎所有晶体中都存在位错，甚至从熔化状态刚刚生长出来的晶体中也存在数量高达10^4cm/cm^{3}的位错。可以认为新生长出的晶体中的位错主要有两个来源。第一个是位错本来就存在于籽晶或其他导致晶体生长的壁面中，这些位错有一部分在晶体赖以生长的表面上露头，就延伸到成长着的新晶体中。另一个是新晶成长时的偶然性生核，其中包括：杂质颗粒等引起的内应力所产生的不均匀生核；成长中的不同部分的表面（如枝晶）之间的碰撞；空位片崩塌所造成的位错环。

位错的萌生可以根据能量关系做一般性分析。分析结果认为，在没有任何缺陷的晶体中位错均匀生核所需应力很大，约为$\frac{G}{10}\sim\frac{G}{30}$，接近理论屈服强度。因此均匀产生位错几乎不可能。

我们已经知道，空位的浓度按指数规律随着温度的升高而增

加，因此高温下的晶体中存在大量的空位。当晶体从高温冷却下来时，冷却速度往往大于平衡冷却速度，晶体中保留了过饱和的空位。这些空位沿一定的晶面凝聚（以面心立方晶体为例，密排面{111}因具有最低的表面能，故过饱和空位优先在那里凝聚），形成空位片。当空位片发展到足够大的尺寸时就会崩塌下来形成位错环。图2-37表现的是这一过程的示意图。不难看出形成的位错环是一个棱柱形的刃型位错。

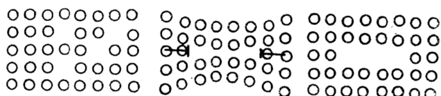


图2-37　空位凝聚形成位错

设在晶体中存在一个硬夹杂物，呈球形，其膨胀系数和晶体有很大差别（设夹杂物收缩后体积较大）。从高温冷却下来时，由于二者收缩量不同，且夹杂物很硬，就会在夹杂物周围的晶体中产生很大的应变场。应变最大的地方是在与夹杂物球表面相接的晶体部分。而最大的剪切应力则如图2-38(a)所示，位于一个圆柱面上，该柱面以晶体的主滑移方向为中心轴线（原来的实验工作所用的晶体结构的主滑移方向为<110>）。当夹杂物与晶体间的膨胀系数差别足够大时，切应力有可能大到理论强度，于是在晶体中紧靠夹杂物表面处形成一小段位错（图2-38(b)）。在切应力作用下位错的刃型部分在圆柱面上朝离开夹杂物的方向移动；而两螺型部分沿着柱面的圆周彼此反方向移动，当两螺型部分在圆柱面上的另外一侧相遇时就产生了一个位错环，如图2-38(c)、(d)所示。这个过程的结果，还留下了一小段位错，它处在最初产生位错之处相对的位置上，它又可以再产生位错环。每形成一个位错环，就可以松弛一部分应力，当应力减小到不足以产

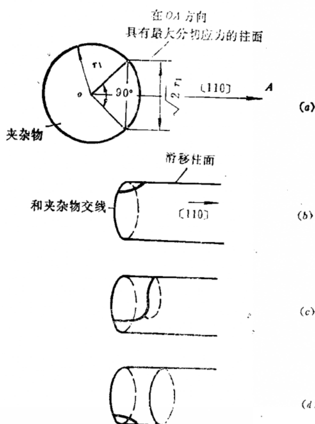


图2-38　在球形夹杂物上产生位错的示意图

生新位错时，依靠这种机制产生位错的过程即告停止。虽然上述

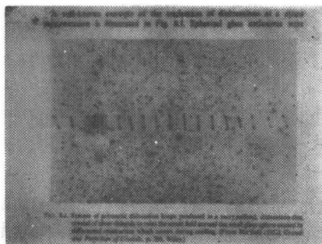


图2-39　小玻璃球处产生棱柱位错（在氯化银晶体中）

机制是一种近乎理想的模型，但是在局部应力集中区产生位错却是普遍的。图2-39是夹杂物处萌生位错的一例。

二、位错增殖机制

在单位体积晶体中所包含的位错线的长度定义为位错密度 ρ。$\rho = L/V$。故 ρ 的单位是为长度/长度^{3}或1/长度^2，如1/cm^2。在经过良好退火的金属晶体中，位错密度约 10^6/cm^2，在剧烈冷加工过的金属中，位错密度可达10^{12}/cm^2。设在图2-40(a)的晶

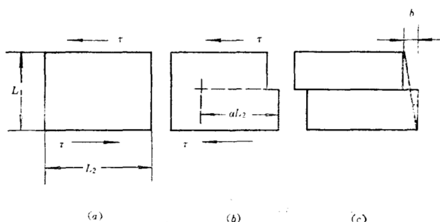


图2-40　滑移的宏观应变量

体上加切应力，且设其右侧存在一个正刃型位错，则此位错向左滑去，最后留下滑移台阶 b，晶体发生切应变为 $\gamma = b/L_1$，其中 L_1为晶体高度。如果位错滑移到晶体中间某处停止，已滑距离占滑移面全长L_2的 α 部分，则切应变为$\gamma = \alpha b/L_1$。由上式很容易证明，如果假设晶体中存在的都是平行的位错，则它们滑移后产生的总应变为

$$\gamma = \rho b \bar{s}$$

式中，ρ为位错密度，$\bar{s}$为许多位错所滑移的距离的平均值。

现在取一块一立方厘米的单晶，边长均为1厘米，处于退火

状态。设其中有位错密度为$10^5/cm^2$，又设晶体点阵常数即位错强度$b=2\times10^{-8}$cm，则当施加外力使其中位错全部滑出晶体以后，晶体的切应变

$$\gamma=\rho b\bar{s}=10^5\times2\times10^{-8}\times1=2\times10^{-3}$$

此时晶体也变成了完整晶体，不能再发生低应力下的变形。但这个γ值太小，不符合退火金属的实际可能的冷变形量。也不符合晶体在退火状态经冷变形后的位错情况：实际情况是变形后位错还极大地增多了。因此必须解释在塑性变形过程中位错一方面消失另一方面新增加（增殖）的机制问题。弗兰克-瑞德机制就是最早提出的一种位错增殖机制。

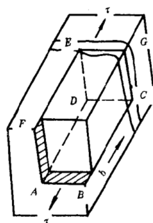


图2-41　晶体中存在的一个L型刃型位错

图2-41是处在两个互相垂直的平面上的刃型位错CDE。当晶体在平行于$ABCD$平面的切应力作用下，位错的CD段将发生移动；DE段则不动。于是迫使CD段只能在滑移面上绕着D点旋转。考查这一过程的特点：把晶体投影示于图2-42。图中(a)代表位错已在滑移面上滑过一段，开始形成一个$\vec{b}$的滑移台阶。此时CD段变成了一段螺型位错。它在切应力下继续回转。当它通过和初始位置对称的位置时，变成了一段符号相反的刃型位错。最后，在同样的切应力下能完成一周旋转，回到原位，而整个滑移面都经历了一个$\vec{b}$的滑移。关键是此时刃型位错段CD依然存在。在外加切应力不变的情况下，CD又开始新的旋转，产生新的变形。这样就解释了晶体中原有位错不多也能发生大量滑移的问题。

进一步分析CD段的旋转运动。已知位错线有弹性能和线张

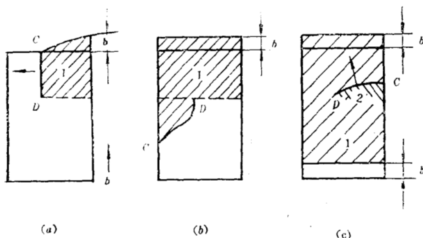


图2-42　L型位错中的CD段运动情况

力：$T\approx u\approx Gb^2/2$。在D点被钉位不动的情况下，其它各点因受均匀分布的切应力作用，向前移动；因各点受力相同，移动速度应该相同，所以很快地CD直线就会变成曲线。图2-43中的七条曲线表示从直线逐渐变成蜷线形状的过程。另一方面，位错有向心恢复力：$f=T/R$，所以曲率半径小的地方比较曲率半径大的地方运动困难，所以在蜷线发展到一定程度后，中心部分的角速度减慢到与远离中心部分相同，整个蜷线的曲率不再变化。以后它即以稳定的角速度绕D点旋转，并且不断产生变形。

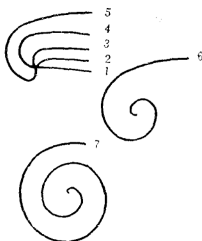


图2-43　L型平面源的蜷线发展

如果一段位错的两端都不能运动，它受力后的运动将如图2-44所示。这时形成的是以D及D'为中心的两条相连的蜷线。由于DD'曲线是在一个滑移面上运动，两端在转过270°后将相遇。相

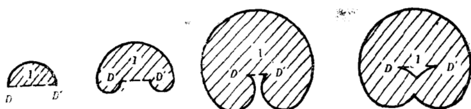


图2-44　弗兰克-瑞德U形平面源

遇的部分在这里是两小段符号相反的螺型位错，它们相遇后互相抵消。其结果是一方面造成一个闭合的位错环；一方面又遗留下一段连结着DD'的线段。在外切应力作用下，环不断扩大，使整个晶体产生一个$\vec{b}$大小的滑移；DD'则在切应力与线张力作用下，先缩短成直线，然后又重新开始新的滑移变形。DD'就成了一个能增殖出一个又一个位错环的滑移位错源。

下面讨论称为极轴机制的一种增殖情况。在图2-45中处于节点D的三条位错线，其

$$\vec{b}_1+\vec{b}_2+\vec{b}_3=0$$

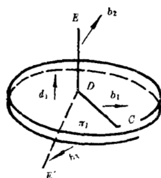


图2-45　一个节点的极轴机制

位错$E'DE$的柏氏矢量垂直于π_1面（DC的滑移面）的分量$\vec{d}_1$在晶体中的作用相当于一个垂直于π_1面具有柏氏矢量为$\vec{d}_1$的纯螺型位错的作用，它把平行于π_1面的诸平面变成一个间距为d_1的连续蜷面。在适当的应力条件下，位错DC在滑移面上滑移，而极轴位错$E'DE$可以是不动的，则DC绕固定点D旋转。每旋转一周，D点就会上升或下降一个螺距d_1，因此DC位错在运动中会蜷曲成为一条具有一个螺距的螺旋线，这和前面叙述的由一个平面源发展出来的在平面上的蜷线不同。

还有一种是通过位错攀移实现位错增殖的情况如图2-46所

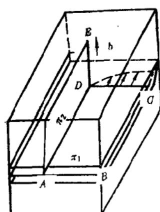


图2-46 L形位错，DC为刃型，DE为螺型，通过空位或间隙原子扩散作用，DC攀移成螺线

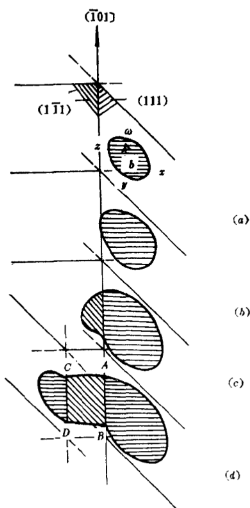


图2-47 面心立方晶体中的交滑移

示。这种情况下，如果晶体内部存在着过饱和的空位或间隙原子，它们就倾向于沉淀在CD上，使纯刃型位错发生攀移，CD位错在与纸面垂直的面上作围绕D点的旋转运动，不断地放出位错环。这种刃型位错攀移增殖机制称为巴登(Bardeen)-赫润(Herring)源。

晶体中的位错增殖机制还有别的。图2-47表示的是一种交滑移机制，是吉尔曼(Gilman)等人观察到的。他们发现位错的增殖往往出现在滑移过程中，很难用固定的位错源解释。但用螺型位错的交滑移则可以解释。图中各步骤代表的是同一个位错环运动的顺序情况。位于(111)面上的位错环在运动过程中受到某种阻碍

作用，但其螺型部分却因有交滑移能力而转移到另一滑移面上，并且随后又可能回到原来的滑移面上。这时其两端被钉扎，螺型位错则成了弗兰克-瑞德源。

三、螺旋线位错的形成机制

如图2-48所示，在晶体中存在位错 AB，其两端被杂质原子或其它原因所钉扎住而不能移动。此位错为一个混合型位错，其

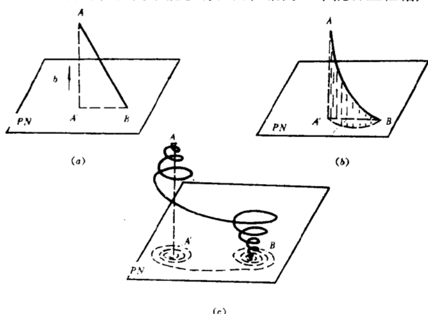


图2-48 螺旋线位错的形成过程

(a) 直线位错AB及其投影$A'B$； (b) 由于攀移AB线成为弧形，AB在以b为轴的柱面上，能在此面上滑移；(c) 更进一步的攀移使AB成为螺旋线

柏氏矢量$\vec{b}$如图中所示。此时位错线在ABA'面上的运动才是纯滑移运动。而AB在垂直于ABA'面上的运动必须通过攀移才能进行。设晶体在某一温度下有大量空位或间隙原子存在，则当空位或间隙原子跑到位错线上之后位错线就能产生攀移。图中(b) 是 AB线经过攀移后的一种形状。这时AB线成了处于柱面上的一条曲

线。它在垂直于柏格斯矢量的平面上的投影即为此柱面的底面。底面的大小正比于空位或间隙原子进入位错线的数量多少。显然，此时位错线AB如发生滑移运动只能在此柱面上进行。位错线在垂直于柱面方向的发展只有依靠继续吸收空位或间隙原子才能发生。所以最初为直线的位错线AB通过攀移和滑移而发展成为曲线，此曲线的形状既取决于滑移又取决于攀移。具体的说，取决于下列诸因素：空位或间隙原子的过饱和度；空位或间隙原子被引入位错线的速度；空位或间隙原子在位错管道内的重行排列的速度；位错在柱面上沿着柏格斯矢量方向滑移的难易程度等。当然，还要考虑晶体的各向异性，这影响到单位长度的位错能量。假设空位或间隙原子沿着位错管道重行排列的速度大于空位或间隙原子扩散到位错区域中的速度（这是在完整晶体中的扩散速度），则攀移后的位错曲线形状将取最低能量的形式，若设单位长度位错的能量，与取向无关，柱面投影就是一个圆弧。

另外一种情况是假若空位或间隙原子过饱和程度甚高，而且它们向位错线上扩散的速度很快，不比它们在位错管道内的扩散速度小多少。这样，空位或间隙原子到达位错线上的速度可能大大超过它们在位错管道内的重行排列速度，则整个位错线上各段的攀移量倾向于相同，最后形成的位错线是分成两枝的螺旋线。这个螺旋线呈锥形，在A与B两点附近的曲率最大。这个形状的出现，大体上和前述L形平面源的发展成蜷线的理由一样，不过这里不是滑移速度因曲率而变化，而是空位或间隙原子的有效过饱和度因曲率而变化。在A和B点，开始时攀移快些，形成曲线后曲率大的地方因热力学原因而发展减慢，直至与离A和B远处发展速度相等后即按同一速度攀移。螺旋线的形状还受到滑移速度的影响，以及原直线位错的情况的影响（像$A'B$和AA'的长短比较是哪一个长些）。

§7 位错的滑移阻力

滑移运动是不引起晶体体积改变的运动，滑移面通常是一个平面，一般也就是晶体的密排面。从前面已经知道，τb是作用在单位长度位错线上的使其在滑移面内运动的力，这是垂直于位错线的一个均匀的力，它与位错的取向无关。为要计算阻碍位错滑移的力，应当考虑采用位错的点阵模型。连续介质模型虽获得很大成功，但其局限性是不言而喻的。它忽略了晶体的点阵结构，因此无法反映位错线附近的正确情况，而是在计算时把位错线附近挖去半径为r_0的部分。下面介绍派耳斯(Peierls)提出的并经纳巴罗(Nabarro)加以改善的所谓派-纳点阵模型。

一、派-纳模型的概念与方程

考虑简单四方结构中的刃型位错，其点阵常数是a与b。设想将晶体沿着滑移面剖开为上下两半后，先沿x方向作相对位移$b/2$，然后再加力拼凑起来形成刃型位错（见图2-49）。在滑移

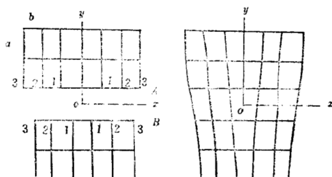


图2-49 两块晶体凑成的刃型位错

面两侧的原子面上的原子是受到切应力作用并进行了适当的位移之后凑成刃型位错的。在A面内的原子受到双重作用力：

(1) A面以上的晶体的作用力，企图使A面内的原子向外铺开；

(2) B面以及B面以下的晶体的作用力，企图使A面内的原子位置向B面上的原子位置对齐。

在平衡状态下，这两种作用力相互平衡；其结果是原子偏离了先前经过$b/2$位移的位置，而作少量移动，达到形成刃型位错的地步。设沿x轴的这种移动为$u(x)$；容易承认，B面上的原子的位移是与此相等而相反的。这样，A面上与B面上的相对应的一对原子之间的距离（沿x轴）就可以表示为

$$\begin{cases} \phi(x)=2u(x)+b/2 & (x>0\text{处}) \\ \phi(x)=2u(x)-b/2 & (x<0\text{处}) \end{cases}$$

从图2-50中可以看出这个式子是合理的。图中任取A、B面上对应的一对原子，它们沿x轴的原距离是$b/2$，在凑成刃型位错时，A上的原子向B靠近$|u(x)|$，B也向A靠近$|u(x)|$，再考虑到原子相对于所取坐标原点的位置，就得到该式。

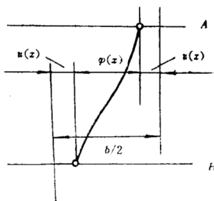


图2-50 A与B面上对应原子的距离

还可以对此刃型位错中的原子排列作进一步的分析：在$x=\pm\infty$处，位错的影响完全消失，两个面上的原子对齐，即那里的$\phi(x)=0$。这样就能定出$u(x)$的特点是

$$\begin{cases} u(\infty)=-b/4 \\ u(-\infty)=b/4 \end{cases}$$

而且在原点附近，$u(x)\to 0$，因为那里的原子在凑成位错时不发

生位移。所以对应的原子位置的距离仍保持不变，即

$$\phi(x)=b/2 \quad (x>0\text{且}x\to 0)$$

$$\phi(x)=-b/2 \quad (x<0\text{且}x\to 0)$$

这样，就可以从分析中大体上得到$u(x)$的曲线形状如图2-51所示。图中也画出了$\phi(x)$的大体形状。

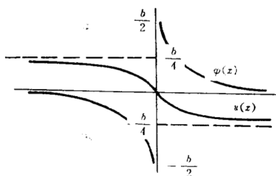


图2-51 沿x轴的位移分布

应当指出，在这些讨论中忽略了沿y轴方向的位移；在弹性理论的模型中，说明刃型位错是有沿y轴的位移的。式子也是针对A面上的原子的位移建立的。为了具体地求出这条位移曲线，派耳斯作了下列的假定：

（1）在A面以上和B面以下的晶体仍都当成各向同性的连续介质来处理；

（2）A与B面之间的切应力被认为是其上的对应的原子之间的相对位移$\phi(x)$的函数，并且是周期为b的正弦函数。因此，A面作用于B面的切应力可表示为

$$\tau_{xy}=C\cdot\sin\left(\frac{2\pi\phi}{b}\right)$$

当位移很小时，A、B面上的原子之间的作用力又可以认为符合虎克定律：

$$\tau_{xy}=G\frac{\phi}{a}$$

于是可以定出

$$C=Gb/2\pi a,\qquad \tau_{xy}=\frac{Gb}{2\pi a}\sin\left(\frac{2\pi\phi}{b}\right) \tag{2-28}$$

反过来，B面作用于A面的切应力就等于

$$-\tau_{xy}=-\frac{Gb}{2\pi a}\sin\left(2\pi\frac{\phi}{b}\right)=\frac{Gb}{2\pi a}\sin\left(4\pi\frac{u}{b}\right) \tag{2-29}$$

另一方面，我们可以根据上述假定(1)，应用弹性力学求出A面以上的弹性体作用于A面的力。现在介绍厄谢拜(Eshelby)的方法。设想把一个柏格斯矢量为$\vec{b}$的位错分解成位错强度为无限小的弹性位错，沿滑移面连续分布。单位长度的x轴上的强度分布为$b'(x')$，在dx'的范围内的强度就应当是$b'(x')dx'$，在整个轴上的强度之和等于b。写成式子就是

$$\int_{-\infty}^{\infty}b'(x')dx'=b$$

已从弹性介质中的位错应力场得知τ_{xy}的表达式为

$$\tau_{xy}=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

在x轴上，它成为

$$\tau_{xy}=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{x}$$

应用到这里，在x轴上坐落在x'与$x'+dx'$两点间的强度为$b'(x')dx'$的小位错在滑移面上另外一点x处的切应力可表示为

$$\tau'_{xy}=\frac{Gb'(x')dx'}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{x-x'}$$

求出展布于 x 轴上的所有小的连续分布的位错的作用切应力

$$\tau_{xy}=\frac{G}{2\pi(1-\nu)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{b'(x')dx'}{x-x'}$$

就是 x 点受到的总切应力。对此结果尚可做进一步分析。因为从 x' 前进到 $x'+dx'$ 时，A、B 面上原子相对位移 $\phi(x')$ 的变化也就是反映了原子错排的程度，所以它也代表该处的小的位错，写成数学关系就是

$$b'(x')=\frac{-d\phi(x')}{dx'}$$

于是有

$$b'(x')=-2\frac{du(x')}{dx'}$$

这样

$$\tau_{xy}=\frac{G}{2\pi(1-\nu)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{b'(x')dx'}{x-x'}$$

$$=-\frac{G}{\pi(1-\nu)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(du(x')/dx')dx'}{x-x'}$$

作用于 A 面上的由 B 面引起的与弹性体引起的两种切应力应该相等，于是得到

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(du(x')/dx')dx'}{x-x'}=\frac{(1-\nu)b}{2a}\sin\left(4\pi\frac{u(x')}{b}\right)\tag{2-30}$$

这就是派-纳模型的基本方程。这个积分方程的派耳斯的解为

$$u(x)=-\frac{b}{2\pi}\mathrm{tg}^{-1}\frac{2(1-\nu)x}{a}=-\frac{b}{2\pi}\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\tag{2-31}$$

式中

$$\zeta = a/2(1-\nu)$$

此解显然满足边界条件：

$$\text{当}x = 0\text{时} \quad u(x) = 0,$$

$$\text{当}x = \infty\text{时} \quad u(x) = -b/4$$

$$\text{当}x = -\infty\text{时} \quad u(x) = b/4$$

这个函数所描述的位错是很窄的，在位错中心以外，A、B两面上的原子已经彼此很好地排成一行。例如，因为$\pi/4 = \text{tg}^{-1}1$，所以在$x = \xi$处的位移就已经是它在无限远处的极限值的一半了（$|u(x)| = \frac{b}{8}$）。一般定义在其中所发生的位移小于极限值的一半（即$-b/8 \leqslant u(x) \leqslant b/8$）的$x$范围为位错的宽度，对于本例，此宽度是

$$w = 2\zeta = \frac{a}{1-\nu}$$

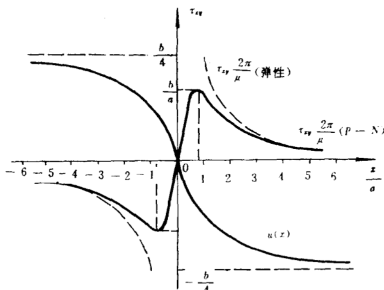


图2-52　派-纳模型与弹性模型的切应力

当取$\nu=0.3$时，位错宽度$w\approx1.5a$，即约1.5个面间距。将$u(x)$代入τ_{xy}的表达式，得到

$$-\tau_{xy}=\frac{Gb}{2\pi a}\sin\left[-2\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\right]$$

在图2-52中，为了比较，同时画出了派-纳模型的切应力、弹性介质模型的切应力以及$u(x)$三者沿x轴的分布。与弹性介质模型不同，点阵模型在位错中心的应力不是趋于无穷大而是保持着有限值，且在$x=0$处有$\tau_{xy}=0$。在$x\gg\xi$时，点阵模型的结果与弹性介质模型的结果趋向于一致。这从表达式本身也可以看出。因为

$$\begin{aligned}\tau_{xy}&=-\frac{Gb}{2\pi a}\sin\left[-2\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\right]\\&=\frac{Gb}{2\pi a}2\sin\left(\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\right)\cos\left(\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\right)\\&=\frac{Gb}{\pi a}\cdot\frac{x}{\sqrt{x^2+\zeta^2}}\cdot\frac{\zeta}{\sqrt{x^2+\zeta^2}}\\&=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)\zeta}\cdot\frac{x\zeta}{x^2+\zeta^2}=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{x}{x^2+\zeta^2}\end{aligned}$$

当$x\gg\xi$时，$\tau_{xy}\approx\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{1}{x}$，这也就是弹性模型的值。

点阵模型的切应力的极大值位于$d\tau_{xy}/dx=0$处，可以算出在$x=\pm\xi$处，其绝对值

$$|\tau_{\max}|=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{\zeta}{\zeta^2+\zeta^2}=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{2\zeta}=\frac{Gb}{2\pi a}$$

这个值说明根据正弦曲线所得结果的切应力最大值是很大的，与理论屈服强度一样。当然，这是局部情况。

螺型位错也可以用派-纳点阵模型来处理，下面简要说明其过程。

开始时，仍然把晶体切成二块，并做相对位移$b/2$，但这里

的位移是沿 z 轴。这样，滑移面两侧的原子就如图 2-53 所示排

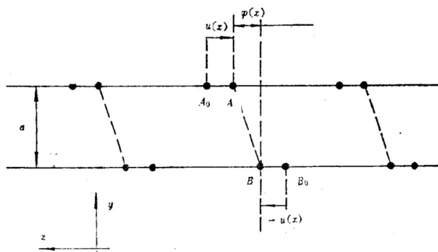


图2-53　两块晶体拚成螺型位错

列。然后施加切应力于 z 轴方向，使切开面拼凑成螺型位错。切位移的值必定是

$$u_z(x) = -b/4, \quad 当x \to \infty$$

$$u_z(x) = b/4, \quad 当x \to -\infty$$

两面上的原子的水平距离同样是

$$\phi(x) = 2u_z(x) + b/2 \ (x>0)$$

$$\phi(x) = 2u_z(x) - b/2 \ (x<0)$$

然后按照和刃型位错类似的讨论，可以得出两面之间的切应力

$$\tau_{y_z} = \frac{Gb}{2\pi a}\sin\left(4\pi\frac{u_z}{b}\right)$$

另一方面，通过把一个位错分成许多小位错的原理，又可得到

$$\tau_{y_z} = \frac{G}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(du_z/dx')dx'}{x-x'}$$

因而同样有积分方程：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(du_z/dx')}{x-x'}dx'=\frac{b}{2a}\sin\left(4\pi\frac{u_z}{b}\right)$$

满足此方程的解有

$$u_z(x)=-\frac{b}{2\pi}\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{2x}{a}\right) \tag{2-32}$$

二、非正弦作用力时派-纳模型的修正

上面所算出的位错宽度很窄，仅约1.5个原子面间距。其所以如此，是由于假定A面与B面之间的力服从正弦关系的结果。如果采取更可能接近实际的原子间作用力关系，则有可能使τ_{xy}与ϕ的关系不再呈对称性，而且使其峰值有显著的下降，进而使滑移面A和B上的原子之间的对齐的作用下降，位错宽度也必随之增加。但这样得出的方程很难求解。福尔曼(Foreman)等人采用了反演的方法处理这个问题。下面给以简单介绍（以刃型位错为例）。

这种方法是从假定的解出发，反过来求τ_{xy}与$u(x)$的关系。假定

$$u=-\frac{b}{2\pi}\left\{\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{x}{\zeta a}\right)+(\alpha-1)\frac{\zeta x}{\zeta^2a^2+x^2}\right\} \tag{2-33}$$

式中α代表一个可调节的参数。当$\alpha=1$时，即相当于正弦力作用的情形；当$\alpha>1$时，相应地位错宽度加大，这些都不难从式中看出。将(2-33)式代入(2-29)式，求得τ_{xy}为：

$$\tau_{xy}=\frac{Gb}{\pi a}\left\{\frac{(x/\zeta)}{\alpha^2+(x/\zeta)^2}+2\alpha(\alpha-1)\frac{(x/\zeta)}{[\alpha^2+(x/\zeta)^2]^2}\right\} \tag{2-34}$$

从下表中可以看出，α越大，则τ_{xy}的峰值就越下降；相应的位错

表2-2　非正弦作用力对位错宽度及切应力的影响

α	1	2	3	4	5	10
$(1-\nu)w/b$	1.000	1.255	1.653	2.076	2.507	4.697
$(2\pi/G)(\tau_{xy})_{max}$	1.000	0.787	0.594	0.471	0.389	0.207
$2\pi(1-\nu)\omega(\tau_{xy})_{max}/\mu b$	1.000	0.988	0.982	0.978	0.975	0.973

宽度也增大。τ_{xy}的最大值与位错宽度之间存在近似的关系：

$$\omega = 2\zeta = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{(\tau_{xy})_{max}}$$

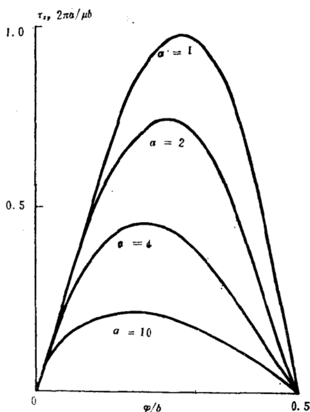


图2-54　非正弦作用力的影响

图2-54示意地表明数字计算的一些结果。一般认为位错宽度约为正弦形模型时得到的值的2、3倍比较合理。

三、位错的能量与派-纳力

我们曾经计算过连续介质中位错的能量，现在计算派-纳模型的位错的能量。根据派-纳模型，位错的能量可以看成是三部分能量的叠加：

$$W = W_A + W_B + W_{AB}$$

其中W_A和W_B是A、B两部分的晶体中的弹性能，W_{AB}为A、B两原子面间的相互作用能，称为错排能。下面首先计算弹性能（仍以刃型位错为例）：

$$W_A + W_B = \frac{1}{2}\int_0^{r_1} b\tau_{xy}dx = -\frac{Gb^2}{4\pi a}\int_0^{r_1}\sin\left(4\pi\frac{u}{b}\right)dx$$

$$= \frac{Gb^2}{4\pi a}\int_0^{r_1}\sin\left[2\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{x}{\zeta}\right)\right]dx,$$

式中的定积分可以利用变量置换法求出。于是可得

$$W_A + W_B = \frac{Gb^2}{4\pi a}\zeta\cdot\ln\left(\frac{\zeta^2 + r_1^2}{\zeta^2}\right)$$

$$= \frac{Gb^2}{8\pi(1-\nu)}\ln\left(\frac{\zeta^2 + r_1^2}{\zeta^2}\right)$$

当$r_1 \gg \zeta$时，

$$W_A + W_B \approx \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\left(\frac{r_1}{\zeta}\right) \tag{2-35}$$

这和连续介质模型的计算结果相近，只不过这里用ζ代表了r_0，即以位错的半宽处作为弹性模型计算的起点，而上限则仍是位错所处的介质的最大尺寸。

派-纳模型的特点主要体现在对接近位错中心部分的处理上。由此算出错排能，这是弹性理论所无法获得的。具体求法是首先考虑派-纳模型中A、B二面上平行于位错线的相对应的各一列原子。错排能应该是使它们错开时外力所做之功，即在切应力τ_{xy}作用下原子位移$\phi(x)$所做之功。每单位长度的原子列的错排能按下式计算：

$$\int_0^{\phi}\tau_{xy}bd\phi = -\frac{Gb^2}{2\pi a}\int_{-b/4}^{u}\sin\left(4\pi\frac{u}{b}\right)d(2u)$$

$$=\frac{Gb^3}{4\pi^2 a}\left[2\cos^2\left(2\pi\frac{u}{b}\right)\right]$$

$$=\frac{Gb^3}{2\pi^2 a}\cos^2\left(\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\right) \qquad (2\text{-}36)$$

各列原子错排能的叠加就是整个滑移面上因位错存在而引起的错排能。作为一级近似，先用积分代替叠加。把上式除以b，即得沿单位长度位错线的且沿x轴也是单位长度的范围内的错排能。总的错排能为：

$$W_{AB}\approx\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Gb^2}{2\pi^2 a}\cos^2\left(\mathrm{tg}^{-1}\frac{x}{\zeta}\right)dx$$

$$=\frac{Gb^2}{2\pi^2 a}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\zeta^2}{x^2+\zeta^2}dx=\frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}$$

如果我们采用通常晶体内的$\ln(r_1/\xi)\approx 10$来计算弹性能，则错排能W_{AB}仅为(W_A+W_B)的1/10左右，说明位错核心区域的能量在总能量中所占的比重并不大。

刚才计算错排能时，由于用积分式代替了叠加式，因此不能反映出位错线附近的原子排列情况对错排能的一些较细致的影响，即所得的是一种平均值。可是错排能的数值是和原子列相对于位错线的相对位置有关的。为了解决这个问题，需要细致分析

位错线与晶格的相对位置。纳巴罗在计算错排能时引入了一个参数 α，以αb表示位错中心到原始对称位置的距离（图2-55）。位

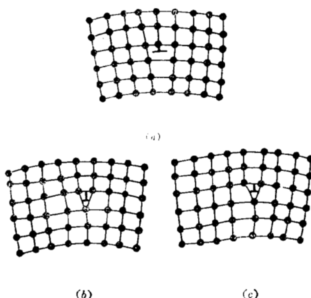


图2-55　位错在晶体中移动的细节
(a) $\alpha=0$;　(b) $\alpha=1/4$;　(c) $\alpha=1/2$

错在从一个原始的对称的平衡位置到达下一个同样的位置的过程中，从细节上看，其附近的原子排列是不一样的，也就是错排程度是不同的，α 就是这种错排程度的表示。但是由于晶体点阵结构的影响，错排能又一定是 α 的周期函数。据此，在 A、B 面上各列原子的坐标可以近似地表示为（取位错中心为原点）：

$$x=\left(\frac{1}{2}n+\alpha\right)b \quad (n=0,\ \pm 1,\ \pm 2\cdots\cdots)$$

把前面求到的一对原子列的错排能的公式(2-36)应用到各列原子上，把错排能叠加起来，即可求出错排能的总值。

$$W_{AB}=\sum_{-\infty}^{\infty}\frac{Gb^3}{4\pi^2 a}\cos^2\left[\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{1}{2}n+\alpha\right)b\frac{1}{\zeta}\right]$$

$$= \frac{Gb^3}{4\pi^2 a} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{\zeta^2}{\left[\left(\frac{1}{2}n + \alpha\right)b\right]^2 + \zeta^2} \tag{2-37}$$

具体计算W_{AB}值，需要利用一些数学技巧，简介如下。

利用富利叶级数的基本定义，可以将三角函数 $\cos(mx)$展开成

$$\cos(mx) = -\frac{1}{\pi}\sum_{-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n m\sin(m\pi)}{n^2 - m^2}\cos(nx)$$

这是因为富利叶级数定义以$2L$为周期的偶函数：

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos\frac{\pi n}{L}x\right)$$

式中

$$a_n = \frac{1}{L}\int_{-L}^{L} f(x)\cos\frac{n\pi}{L}x dx \quad (n=1,\ 2\cdots\cdots)$$

用在本例中($f(x) = \cos mx$)

$$\cos(mx) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\frac{n\pi}{\pi}(mx)$$

因为$\cos(mx)$是周期函数，在$[-\pi,\pi]$上绝对可积，所以

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx)\cos(nmx)dx$$

经过具体积分，可以得到

$$a_n = \frac{2}{\pi}\left[\frac{m\sin(m\pi)\cos(mn\pi) - mn\cos(m\pi)\sin(mn\pi)}{m^2 - m^2n^2}\right]$$

考查这个式子，$\cos(mn\pi) = (-1)^{mn}$，$\sin(mn\pi) = 0$，于是

$$a_n = -\frac{2}{\pi}\left[\frac{(-1)^n m\sin(m\pi)}{n^2 - m^2}\right]$$

注意，本式中的 n 实际上是一个新的代表mn的值。同 理 可 求得

$$a_0 = \frac{2}{\pi}\int_0^\pi \cos(mx)dx = \frac{2\sin(m\pi)}{\pi m}$$

这样，三角函数$\cos(mx)$就可写成

$$\cos(mx) = \frac{\sin(m\pi)}{\pi m}$$

$$+\left(-\frac{2}{\pi}\right)\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{(-1)^n m\sin(m\pi)}{n^2-m^2}\right]\cos(nx)$$

$$= -\frac{1}{\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[\frac{(-1)^n m\sin(m\pi)}{n^2-m^2}\right]\cos(nx)$$

后一步的得出，是利用了$(-1)^n=(-1)^{-n}$这个关系。在上式中，令$x=\pi$，两边除以$\sin(m\pi)$，得

$$\pi\text{ctg}(m\pi) = -\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{m}{n^2-m^2}(-1)^n\cos(n\pi)$$

$$= -\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{m}{n^2-m^2}$$

在式右边级数上每项都加上$n/(n^2-m^2)$，由于

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{n}{n^2-m^2}=0$$

得到

$$\pi\text{ctg}(m\pi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{n-m}{n^2-m^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{n+m}$$

再用$m=p+iq$和$m=p-iq$分别代入上式（$i=\sqrt{-1}$），得

$$\pi\text{ctg}(p+iq)\pi = \sum\frac{1}{n+(p+iq)}$$

$$\pi\text{ctg}(p-iq)\pi = \sum\frac{1}{n+(p-iq)}$$

把以上二式相减，就能得到

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{(p+n)^2+q^2}$$

$$=-\left(\frac{\pi}{2iq}\right)[\mathrm{ctg}(p+iq)\pi-\mathrm{ctg}(p-iq)\pi]$$

将此式与W_{AB}的表达式对比，即可看到

$$W_{AB}=\frac{Gb^3}{4\pi^2 a}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{\zeta^2}{\left[\left(\frac{1}{2}n+\alpha\right)b\right]^2+\zeta^2}$$

$$=\frac{Gb^3}{4\pi^2 a}\left(\frac{2\zeta}{b}\right)^2\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{(p+n)^2+q^2} \qquad (2\text{-}38)$$

式中是令$p=2\alpha$，$q=2\zeta/b$。

于是就可以把错排能表示成三角函数

$$W_{AB}=\frac{Gb^3}{4\pi^2 a}\left(\frac{2\zeta}{b}\right)^2(-1)\frac{\pi}{2iq}$$

$$[\mathrm{ctg}(p+iq)\pi-\mathrm{ctg}(p-iq)\pi]$$

$$=-\frac{Gb^2}{8\pi(1-\nu)i}[\mathrm{ctg}(p+iq)\pi-\mathrm{ctg}(p-iq)\pi]$$

为了进一步看清错排能的特点，需要把复三角函数作必要的变换：

$$\mathrm{ctg}(p+iq)\pi-\mathrm{ctg}(p-iq)\pi$$

$$=-\frac{\sin(2iq\pi)}{\sin(p+iq)\pi\cdot\sin(p-iq)\pi}$$

$$=-\frac{-\frac{1}{i}\sinh(2q\pi)}{\sin^2(p\pi)-\sin^2(iq\pi)}$$

$$=\frac{1}{i}\frac{\sinh(2q\pi)}{\sin^2(p\pi)+\sinh^2(q\pi)}$$

$$= -\frac{2i\sinh(2q\pi)}{\cosh(2q\pi)-\cos(2p\pi)}$$

这里要多次使用实三角函数与复三角函数以及双曲函数的一些关系。当$2q\pi \gg 1$时（实际上也如此）

$$\sinh(2q\pi) \approx e^{2q\pi}/2 \approx \cosh(2q\pi)$$

于是

$$W_{AB} = \frac{-Gb^2}{8\pi(1-\nu)i}[\operatorname{ctg}(p+iq)\pi - \operatorname{ctg}(p-iq)\pi]$$

$$= \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}\frac{\sinh(2q\pi)}{\cosh(2q\pi)-\cos(2p\pi)}$$

$$\approx \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}[1+2e^{-2q\pi}\cos(2p\pi)]$$

$$= \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}[1+2e^{\left(-\frac{4\zeta\pi}{b}\right)}\cos(4\alpha\pi)] \qquad (2\text{-}39)$$

由此式可见，错排能分为两部分，前一部分与位错线的位置没有关系，但它是错排能的主要部分；第二部分较小，但它是α的周期函数，即位错位置的周期函数，具体反映出位错线在晶体中移动时所发生的能量的起伏。因此，它具有重要意义。其振幅的两倍即相当于单位长度位错线移动所需的激活能：

$$\Delta W = \frac{Gb^2}{\pi(1-\nu)}\exp\left(-\frac{4\pi\zeta}{b}\right) \qquad (2\text{-}40)$$

式子表明激活能受到许多因素影响，其中包括位错宽度2ζ；宽度越大，激活能越小。

由于位错线的能量是α的函数，即位错线沿滑移面移动时要通过一系列能量峰和谷的位置。让位错线翻越能垒的作用力可以算出为

$$F = -\frac{\partial W_{AB}}{\partial x} = -\frac{\partial W_{AB}}{\partial(\alpha b)} = -\frac{1}{b}\frac{\partial W_{AB}}{\partial \alpha}$$

$$= \frac{2Gb}{(1-\nu)}\left[\exp\left(-\frac{4\pi\zeta}{b}\right)\sin(4\alpha\pi)\right] \qquad (2\text{-}41)$$

当$\sin(4\alpha\pi)=1$时，F达到极大值F_{max}，与此相应的切应力为

$$\tau_p = F_{\max}/b = \frac{2G}{1-\nu}\exp(-4\pi\zeta/b)$$

$$= \frac{2G}{1-\nu}\exp\left(-\frac{2\pi}{1-\nu}\cdot\frac{a}{b}\right) \qquad (2\text{-}42)$$

τ_p称为派-纳力，亦即使位错克服点阵阻力而运动的临界切应力。在简单立方中，$a=b$，设$\nu=0.3$，得出临界切应力$\tau_p=3.6\times10^{-4}G$。这比没有位错存在的理想的完整晶体的理论屈服应力$10^{-1}G$小得多，从而证实了位错的易动性质和有位错的晶体容易变形。这是一个很大的成功。但是，上述结果仍然是在进行了一系列简化后所得到的，在定量方面还是不大完善的。例如，这个模型算出的屈服强度仍然比实际屈服强度高不少。改进的措施包括采用非正弦力，以增大位错宽度等。实际上如果位错是以弯曲形状存在，即位错上存在扭折，则总能量虽高些，派-纳力却较低，更接近实际屈服强度。

§8 位错运动的速度与应力的关系

宏观上的塑性变形主要是微观上位错在外力作用下运动的结果。如果以$\dot{\varepsilon}=d\varepsilon/dt$表示宏观变形的应变速率，以$\bar{v}$表示位错运动的平均速率，$\rho_m$表示可以运动的位错密度，则应当存在下面的关系

$$\dot{\varepsilon} = \Omega b \rho_m \bar{v} \qquad (2\text{-}43)$$

为了讨论位错运动的速度v，先从运动着的位错的应力场开始，研究位错运动的极限速度。

一、运动位错的应力场和位错运动的极限速度

前面已经导出并多次应用过静止状态的直线状位错的应力场公式。根据弹性力学，含有运动位错的各向同性的弹性介质应该满足方程式

$$G\nabla^2\vec{u}+\frac{G}{1-2\nu}\text{grad div}\vec{u}=\rho_1\frac{\partial^2\vec{u}}{\partial t^2} \tag{2-44}$$

式中，$\vec{u}$为位移，ρ_1为弹性介质的密度。

设有螺型位错，位错线沿 z 轴，由于没有体膨胀，$\delta=\text{div}\vec{u}=0$，运动方程就简化为

$$\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}=\frac{1}{c^2}\cdot\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}$$

式中，$c=\sqrt{G/\rho_1}$，代表介质中弹性横波的波速，也就是介质中的声速。

下面求运动方程的解。该解在 v 为零时必须还满足静止位错时的解，即$u_z=b\theta/2\pi$。上面所写出的运动方程是一个典型的波动方程，与电磁波传播方程完全相似，它的解可以用洛伦兹变换来求出。引入新变量x_1（设螺型位错沿 x 轴运动）：

$$x_1=\frac{x-vt}{\beta} \qquad \beta=\sqrt{1-(v^2/c^2)}$$

把它代入运动方程，并考虑到

$$\frac{\partial u_z}{\partial t}=\frac{\partial u_z}{\partial x_1}\cdot\frac{\partial x_1}{\partial t}=\left(-\frac{v}{\beta}\right)\frac{\partial u_z}{\partial x_1}$$

$$\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}=\frac{v^2}{\beta^2}\cdot\frac{\partial^2 u_z}{\partial x_1^2}$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial x}=\frac{\partial u_z}{\partial x_1}\cdot\frac{\partial x_1}{\partial x}=\frac{1}{\beta}\cdot\frac{\partial u_z}{\partial x_1}$$

$$\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}=\frac{1}{\beta^2}\cdot\frac{\partial^2 u_z}{\partial x_1^2}$$

得到

$$\left(\frac{1}{\beta^2}-\frac{1}{c^2}\cdot\frac{v^2}{\beta^2}\right)\frac{\partial^2 u_z}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}=0$$

根据定义，左面第一项括号中的结果等于1，故运动方程成为

$$\frac{\partial^2 u_z}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2}=0$$

此式在形式上与静止状态的方程完全一样，因而可以也选用类似的解：

$$u_z=\frac{b}{2\pi}\text{tg}^{-1}\left(\frac{y}{x_1}\right)=\frac{b}{2\pi}\text{tg}^{-1}\left(\frac{\beta y}{x-vt}\right)$$

此式显然满足静止状态，因为当$v=0$时，$x_1=x$，与静止状态的解完全一样了。

运动位错的应力场公式是

$$\tau_{xz}=G\frac{\partial u_z}{\partial x}=-\frac{Gb}{2\pi}\cdot\frac{\beta y}{(x-vt)^2+\beta^2y^2}$$

$$\tau_{yz}=G\frac{\partial u_z}{\partial y}=\frac{Gb}{2\pi}\cdot\frac{\beta(x-vt)}{(x-vt)^2+\beta^2y^2}$$

在此基础上，可以进一步算出运动位错的能量。运动位错除了具有弹性应变能以外，还应有动能。设应变能为U_p，动能为U_k，根据弹性理论，它们分别是

$$U_k=\frac{1}{2}\int\rho_1\left(\frac{\partial u_z}{\partial t}\right)^2dxdydz=\frac{1}{2}\left(\frac{\rho_1 v^2}{\beta}\right)\int\left(\frac{\partial u_z}{\partial x_1}\right)^2dx_1dydz$$

$$U_p=\frac{1}{2}\int G\left[\left(\frac{\partial u_z}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}\right)^2\right]dxdydz$$

$$=\frac{G}{2}\int\left[\frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial u_z}{\partial x_1}\right)^2+\beta\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}\right)^2\right]dx_1dydz$$

这都是指单位长度的螺型位错的。已经知道，静止螺型位错的应变能$U_0=(Gb^2/4\pi)\ln(r_1/r_0)$，而且静态时

$$U_0=U_p$$

所以

$$\frac{Gb^2}{4\pi}\ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)=\frac{G}{2}\int\left[\left(\frac{\partial u_z}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}\right)^2\right]dxdydz$$

因为应力场对z轴来说是对称的，所以应当存在下列关系

$$\frac{G}{2}\int\left(\frac{\partial u_z}{\partial x}\right)^2dxdydz=\frac{G}{2}\int\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}\right)^2dxdydz=\frac{U_0}{2}$$

当考虑动态情况时，由于静态位错中的u_z与x、y的关系类似于动态位错中的u_z与x_1、y的关系，因而可以认为

$$\frac{G}{2}\int\left(\frac{\partial u_z}{\partial x_1}\right)^2dx_1dydz=\frac{G}{2}\int\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}\right)^2dx_1dydz=\frac{U_0}{2}$$

将其代入运动位错的能量表达式，可以求出运动中的螺型位错的动能U_k、应变能U_p及总能量U：

$$\left.\begin{aligned}U_k&=\frac{\rho_1 v^2}{2\beta}\cdot\frac{U_0}{G}=\frac{1}{2}\frac{v^2}{\beta}\left(\frac{\mu}{c^2}\right)\frac{U_0}{G}=\frac{v^2}{2c^2\beta}U_0\\U_p&=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\beta}+\beta\right)U_0=\frac{2c^2-v^2}{2c^2\beta}U_0\\U&=U_k+U_p=\frac{1}{\beta}U_0\end{aligned}\right\}\qquad(2\text{-}45)$$

上面的式子说明，当$v\to c$时，$\beta\to 0$，位错的能量趋向无穷大。因此，介质中的声速是位错运动的极限速度，与光速在相对论中所处的地位极其相似。

当$v\ll c$时，即位错运动的速度小时，

$$U\approx U_0\left(1+\frac{v^2}{2c^2}\right)=U_0+\frac{1}{2}m_0v^2$$

这是设$U_p = U_0$和$\beta = 1$的结果，式中

$$m_0 = \frac{U_0}{c^2} = \frac{\rho_1 b^2}{4\pi} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right) \tag{2-46}$$

m_0为每单位长度螺型位错的表观静止质量。运动质量m为

$$m = \frac{U}{c^2} = \frac{m_0}{\beta}$$

从上面可以看出，位错的静止质量不大，长度为b的一段位错线的静止质量约为$\rho_1 b^3$，相当于一个原子的质量。运动质量则随着运动速度的增加而增加。这些关系也和特殊相对论中的能量与质量的关系相似。

关于刃型位错的运动分析，也可遵循类似方法；但因为刃型位错的应力场中有纵位移和横位移，而纵横声波的速度又不相同，所以分析要复杂些，但结论是相同的，位错运动的极限速度是介质中的声速。关于位错运动速度以声速为极限的结论是在线弹性理论基础上获得的，线弹性理论在声速条件下的应用尚有疑问，因此，似乎还不能说这个问题已最终解决。

二、位错速率与应力的关系

近年来发展了直接观察位错运动的一些实验方法，其中有电子显微镜薄膜衍衬法和两次浸蚀法等。吉尔曼等首先在 LiF 的单晶体上用腐蚀坑显示位错露头点测出位错速率与应力之间的关系。其结果见图

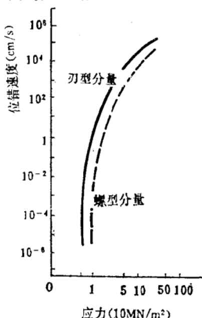


图2-56 LiF中位错速率与应力关系 (110)[110]横波的速度 = 3.6×10^5cm/s

2-56。这种方法的原理是把试样在加力前后都进行腐蚀，加力过后的位错所在位置是一个小而尖的锥形蚀坑，但加力前的位错位置经过两次腐蚀，是一个较大的平底蚀坑，二者可以区别开来。位错运动的距离除以加力的持续时间即是位错运动速率。同时记录加力的大小，即可求得每一应力条件下的速率。从图中可以看到，当应力不大时，$\ln v$与$\ln\sigma$的关系呈线性。而且螺型位错的运动速率低于刃型位错在同一应力下的运动速率，在一个相当大的范围内，只有后者的大约1/50。但两者的极限速度却相同，即声速。同时还能看到存在一个使位错运动的应力极小值，低于此值时，观察不到晶体中位错运动，此值约为$5MN/m^2$。在应力不大时的直线阶段的斜率称为位错速率的应力敏感指数m。在LiF中此值在15～25之间。把实验结果用式子表示：

$$v = B(\sigma)^m \tag{2-47}$$

表2-3中列出了不同材料的m值。由表可见，本质上很软的面心

表2-3　不同材料的m值

材　料	温　度	试验方法	m
Si(金刚石立方)	600～900℃	蚀坑法	1.4
Ge(金刚石立方)	42●～700℃	蚀坑法	1.4～1.9
W(b.C.C.)	室　温	蚀坑法	4.8
Fe+3.5Si	室　温	蚀坑法	35
Ag(f.C.C.)			～300

立方金属，其m值很大。本质上很硬的材料，如硅等，m很小。体心立方的材料则介乎两者之间。

位错在滑移面内运动时，滑移面上外加应力所做之功，一部分是用来增加位错的动能，一部分则消耗在点阵的振动上。有几种过程消耗能量。它们是(a)热弹性阻尼，(b)辐射阻尼和(c)声波的散射。位错运动速度增加，上述三种能量消耗能增加。当位

错速度到达某值后，外加应力增加的功完全消耗在这些过程中的时候，位错便不再继续增加动能。而以外加应力所能够允许的速率运动，位错以较高速率运动所遇到的这些阻力的计算，包含着位错理论中的一些最困难的问题，不拟在这里介绍了。

三、塑性变形的热激活问题

决定塑性变形的主要因素是外加应力，塑性变形在液氦温度下(4K)还能进行，表明位错的滑移不一定依靠热激活过程。但是，热激活过程对塑性变形还是有影响的，这可以从实验结果上看出来：拉伸试验求出的屈服和流变应力是随温度和变形速率而变化的；蠕变试验中的应变是随时间而变化的。这种效应虽然只是在高温变形中才特别突出，但在低温变形中也是存在的。这类现象可以用位错越过障碍的热激活过程来解释，即位错借助于热起伏越过障碍而进行滑移。图2-57是对硅铁进行试验所得的结果，表明了刃型位错在不同温度下和应力下的运动速度，从中可以看出应力对位错运动的影响很大，温度对位错的

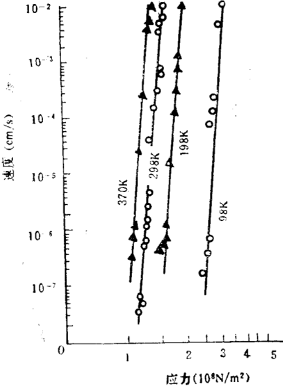


图2-57　Fe-3%Si中刃型位错运动速度对应力与温度的依存关系

影响也明显。

晶体中的原子，以它的平衡位置为中心，不断地做不规则的热运动；晶体中的位错也是这样，尽管不受外力作用，它也不是静止的，而是沿着其滑移面做不规则的振动。位错的节点和被杂质原子等钉扎的点可以认为是相对固定的点，即振动的节点。温度越高，振动的振幅也越大，振动能越高。下面对位错的振动作一简单的讨论。

设想位错线的两端被固定，在线张力的作用下，位错线可以沿滑移面作自由振动。假定阻尼效应可以被忽略，则长度为 l 的一段位错线应满足波动方程（一维波动方程）：

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}=\frac{m_0}{T_l}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \qquad (2\text{-}48)$$

在任意的时间t，在$x=0$和$x=l$处，均有$y=0$。沿位错的波速

$$v=\sqrt{\frac{T_l}{m_0}}=\sqrt{\frac{U_0}{U_0/c^2}}=c$$

即等于晶体中的声速（忽略横波与纵波的波速差异）。位错线振动的固有频率为

$$\nu=\frac{c}{2l}$$

根据德拜比热理论，原子振动的德拜频率为

$$\nu_D=\frac{k\Theta}{h}=\left(\frac{3}{4\pi}\frac{1}{V_a}\right)^{1/3}c$$

这里的V_a为原子体积。对于简单的晶体，可取

$$V_a^{1/3}\approx b,\quad \nu_D=10^{13}/\text{秒}$$

因此位错振动的固有频率约为

$$\nu = 10^{13}\ \frac{b}{l}\text{秒}^{-1}$$

设位错的振幅为a；根据能量均分原理，运动的每一个自由度具有$\frac{1}{2}kT$的能量，所以位错的振动能

$$\frac{\pi^2 c^2 m_0 a^2}{2l} = \frac{1}{2}kT$$

即

$$a = \frac{1}{\pi}\left(\frac{kTl}{U_0}\right)^{1/2} \tag{2-49}$$

在$T = 300°\text{K}$，$kT \approx 0.02$电子伏。设$l = 1000b$时，则位错线的振幅约为一个原子距离。

上面这些讨论所涉及的内容的基础，在一般物理学中都有讲解。

从蚀刻技术中测得，位错在不完整的不纯的晶体中的迁移的平均速度可以表示为如下的激活过程

$$v = v_C \exp\left(\frac{-\Delta F \neq}{kT}\right) \tag{2-50}$$

其中k为玻尔兹曼常数，T为绝对温度，$\Delta F \neq$为标准激活能，表示要使位错充分激活所需要的能量。v_C为当$\Delta F \neq$为零时的位错速度，又可看成位错可能达到的最大速度即声速。以这一速度迁移的位错处于充分激活状态，该状态具有最高的自由能。

§9. 位错的攀移力

位错的攀移是刃型位错的一种运动方式。攀移在晶体处于高温时所发生变形的过程中具有重要意义。攀移离不开点缺陷与刃型位错的交互作用，而这种交互作用又是通过在多余半原子面上

形成或消失割阶以及割阶的运动进行的。所以割阶在位错的攀移中具有重要作用。割阶可以通过位错之间的相交截而产生，也可以由刃型位错的多余半原子面与点缺陷交互作用而产生。图2-58

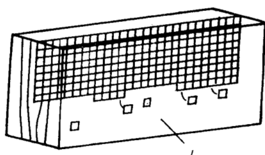


图2-58 通过点缺陷产生的割阶

表示的是由空位与间隙原子来到或离开多余半原子面而产生的割阶。当空位和间隙原子在位错线上移动的时候，实际上也就是割阶在运动。

攀移是刃型位错多余半原子面垂直于滑移面的升降。整根位错线同时上升或下降是很困难的，所以攀移往往是局部地产生，这就在位错线上形成割阶。除去点缺陷以外，外力也会影响位错的攀移。

由于攀移过程牵涉到相当复杂的微观机制，为了使讨论简化，仅就刃型位错的攀移加以说明。不过，混合位错也是可以攀移的，这一点在关于位错的增殖问题部分已经做过一些说明。

首先，根据点缺陷的形成能粗略地估计一下攀移所需的力。设单位长度的位错线攀移后所引起的体积变化为

$$dV = bds$$

式中，ds是垂直于位错线方向的攀移距离。若大致认为每个原子的体积约为$v \approx b^3$，b为位错的柏氏矢量，则对应于体积变化的点缺陷数就是

$$dN = \frac{dV}{v} = \frac{ds}{b^2}$$

又若点缺陷的形成能为U_f，则攀移力所做的功$F_m ds$应等于dN个点缺陷的形成能，所以攀移力

$$F_m = U_f dN/ds = U_f/b^2$$

从点缺陷的形成能理论知道，形成能是一个相当大的数值。空位形成能约为$Gb^3/5$，间隙原子的约为其三倍。这样，要是依靠机械力使位错攀移，就需有约$Gb/5$的力，所需应力则与理想晶体的理论屈服强度相近。这个数字比位错滑移的力大许多，说明位错攀移确实比滑移困难得多。

那么，克服上述攀移阻力的攀移驱动力又可能有哪些呢？

（1）弹性应力：纯粹的切应力并不会引起体积变化，对于攀移起作用的只是外来的正应力（这和滑移完全不同，对滑移起作用的是切应力）。沿攀移面作用的张应力使体积增加，促进正刃型位错向下攀移（负攀移），沿攀移面作用的压应力则促使它向上攀移（正攀移）。根据位错受力的一般理论，位错所受作用力沿攀移面的分量为

$$F_c = \sigma' b$$

这里的σ'表示通过攀移面作用的应力矢量的正应力分量。

（2）渗透力：如果晶体中具有过饱和的空位浓度，空位凝聚在位错上会促使正刃型位错向上攀移，反之则可因欠饱和而向下攀移。这相当于有一个垂直于滑移面的力F_s。此力可以估计如下：当空位浓度C与平衡浓度C_0不同时，相当于空位形成能自U_f降为U_f'，因此位错攀移的阻力也从U_f/b^2下降为U_f'/b^2。F_s即等于它们的差值

$$F_s = \frac{U_f}{b^2} - \frac{U_f'}{b^2} = \frac{kT}{b^2}\ln\left(\frac{C}{C_0}\right)$$

式中，$C_0=\exp(-U_f/kT)$，表示温度T时的平衡浓度。这种力称之为“渗透力”。如果此渗透力真能导致位错攀移，则F_s必须等于F_m，亦即此时的$C=1$。在一般情况下，C值不会如此之大，除非金属经严重冷加工、淬火或辐照后才能得到较高值，通常它比这种极端情形低得多。因此，F_s一般不足以使位错线攀移。以淬火为例，自T_1淬火到T_2可得到过饱和空位浓度

$$\frac{C_1}{C_2}=\exp\left[-\frac{U_f}{k}\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right)\right]$$

和一个力

$$F_s=F_m\frac{T_2-T_1}{T_1}$$

从上式可看出，只要温差足够大，与F_m比较，F_s还是不小的，于是施以较低的应力便足以使位错攀移。

（3）线张力：如果位错线在攀移面内有一曲率$1/R$，则将有一个由位错线张力促使位错攀移的力

$$F_t=T/R$$

从以上的初步分析中可看出，攀移的驱动力若是外力，则其值将要求接近理论屈服强度，一般情况下，只有在位错塞积处或许有此可能。至于“渗透”力和线张力，对位错攀移来讲，均可以忽略不计。这并不是说位错攀移就不可能了，而是表明一般情况下，整段位错的攀移是很困难的。但通过割阶沿位错线的运动，亦即逐步地产生攀移还是可能的。由于这种攀移与点缺陷的扩散有关，故称为扩散攀移。弗里埃德尔对此的分析如下。

设有一纯刃型位错，当割阶自位错一端移到另一端时，位错就攀移了距离b。设x为位错线上割阶的平均距离，割阶浓度c_j就等于

$$c=b\frac{1}{x}$$

若割阶移动的平均速率为v_j，位错攀移的速率就可表示为

$$v=\frac{b}{x}v_j=c_jv_j$$

影响攀移速率的第一个因素是割阶浓度c_j，在热平衡状态，纯粹取决于割阶的形成能U_j：

$$c_j=\exp(-U_j/kT)$$

在变形过程中可以通过位错的交截，产生大量的过饱和的割阶。影响攀移速率的第二个因素是割阶移动的速率，这与割阶和空位的交互作用以及空位的扩散都有关系，其中哪一个过程是控制割阶移动速率的因素，要通过具体分析才能确定。

假定位错发射空位（或其逆过程）控制了攀移的速率。刃型位错中割阶每移动一步，相当于产生一个空位，同时使空位移过一个原子间距。在有利于攀移的外加力F_c的作用下，产生这样的移动所需的能量为$U_f+U_c-F_cb^2$，其中U_f为空位形成能，U_c为空位移动的激活能，它们的和就等于空位引起的自扩散激活能。设n为空位可能跳入的坐位数（在密排结构中等于11），因此，

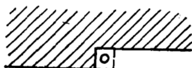


图2-59 割阶的移动

在图2-59的情况下，割阶自左至右的位移的几率为

$$\nu_j'=n\nu\cdot\exp\left(-\frac{U_f+U_d-F_cb^2}{kT}\right)$$

式中，ν为原子振动频率。而位错线附近过饱和的空位产生的对位错的渗透力F_s使割阶反向运动的几率为

$$\nu_j''=n\nu\cdot\exp\left(-\frac{U_f+U_d-F_sb^2}{kT}\right)$$

因而，割阶沿位错运动的速率为

$$v_j = b(v_j' - v_j'') = n\nu b \cdot \exp\left(-\frac{U_f + U_a}{kT}\right)$$

$$\times\left[\exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right)\right]$$

于是位错攀移速率

$$\nu = n\nu b \exp\left(-\frac{U_j}{kT}\right)\exp\left(-\frac{U_f + U_d}{kT}\right)$$

$$\left[\exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right)\right] \tag{2-51}$$

具体应用时，考虑几种不同情况：

（1）作用于位错的弹性应力和渗透 力 都 很 小，即$|F_c b^2| \ll kT$，$|F_s b^2| \ll kT$，近似地有

$$\frac{(F_c - F_s)b^2}{kT} \approx \exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right)$$

因此，

$$\nu = n\nu b c_j \frac{(F_c - F_s)b^2}{kT} \exp\left(-\frac{U_f + U_d}{kT}\right)$$

根据扩散理论，可求出自扩散系数D等于

$$D \approx n\nu b^2 \exp\left(-\frac{U_f + U_d}{kT}\right)$$

因此

$$\nu = D c_j \frac{(F_c - F_s)b}{kT} = D\frac{(F_c - F_s)b}{kT}\exp\left(-\frac{U_j}{kT}\right)$$

如果割阶处于热平衡状态，攀移的激活能就等于

$$U = U_f + U_d + U_j$$

比自扩散的激活能$U_f + U_d$要大些。如果有过饱和 的 割 阶，激活

能就和自扩散的相同。

（2）如果$|F_c b^2|\gg kT$，或$\sigma'\gg kT/b^2$，则激活能的数值要减去$\sigma' b^3$。塞积群中的领先位错处可以满足这个条件，通常首先离开滑移面。

（3）如果$|F_s b^2|\gg kT$，或空位浓度C满足条件

$$\left|\frac{C-C_0}{C_0}\right|\gg e-1\approx 1.7$$

这是有过饱和空位的情况

$$v\approx n\nu bCc_j\exp\left(-\frac{U_d}{kT}\right)$$

以上对攀移速率的计算，都是假定空位和割阶的交互作用是决定速率的主要因素。这只是在割阶附近空位浓度尚未达到饱和值时方能成立。如果晶体内空位扩散的速率比割阶发射或吸收空位的速率要低些，割阶处空位达到饱和程度，决定攀移速率的就不是空位和割阶的交互作用，而是空位的体扩散。

参 考 文 献

1. Cottrell, A. H.: Dislocations and Plastic Flow in Crystals, Oxford, 1953. 中译本：葛庭燧译：晶体中的位错和范性流变，科学出版社，1960
2. 晶体缺陷和金属强度，固体物理理论学习报告汇编，科学出版社，（上册）1962
3. 冯端等，金属物理，科学出版社，1964，1987
4. Friedel, J.: Dislocations, Pergamon Press, 1964. 中译本：王煜译：位错，1980
5. Hull, D.: Introduction to Dislocations, 2nd Edition, 1975;

3rd Edition, 1984

6. Hirth, J. P. and Lothe, J.: Theory of Dislocations, 1986, 1982

习　　题

1. 在一块立方体形状的单晶内部有一片铅垂的正方形空位片。当沿着单晶上下表面施加切应力 τ 时（τ 的方向垂直于空位片），空位片可能发生什么变化？（可分别讨论空位片尺寸很小、空位片尺寸很大以及空位片处在滑移面上与否多种情形）。
2. 若某金属单晶中的位错密度为$\rho = 10^{10}\text{cm}^{-2}$，求每立方厘米中的位错线长度（设位错线为直线）。问晶体中大约每隔多少原子有一条位错线？
3. 若取应力函数$\phi = (Ar\ln r + B\frac{1}{r} + Cr^2)\sin\theta$，试求直刃型位错的$\sigma_{rr}$、$\sigma_{\theta\theta}$和$\sigma_{r\theta}$。
4. 画出螺型位错应力场的τ_{xz}与τ_{yz}的应力图（用类似刃型位错应力分量图的画法）。
5. 设在铜的一个晶粒中有一个螺型位错，若取 $r_1 = 1\text{cm}$，$r_0 = 10^{-7}\text{cm}$，求单位长度位错的应变能，并求以 $r = 10^{-4}\text{cm}$为界的两部分各占多少应变能？（设 $b = 2.5\times 10^{-8}\text{cm}$，$G = 4\times 10^{6}\text{N/cm}^2$）
6. 设在一个滑移面上存在二段平行的同号的直线状刃型位错，其两端均被钉扎。二段位错的长度都是L，距离也是L。画出它们在切应力作用下发生弯曲和形成蜷线的过程中的相互作用情况，并加以说明。
7. 推导螺型位错的点阵模型的式子 $\tau_{yz} = \dfrac{Gb^2}{2\pi a}\sin\left(\dfrac{4\pi u_z}{b}\right)$。

8. 计算派-纳模型中$W_A + W_B = \frac{Gb^2}{4\pi a}\int_0^{r_1} \sin\left[2\mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{x}{\zeta}\right)\right]dx$中的定积分。

9. 详细进行求派-纳模型中的W_{AB}时的三角函数变换。

10. 在位错攀移中，渗透力为F_s，攀移（阻）力为F_m，求当$F_s = F_m$时的空位浓度C的值。

第三章　典型晶体中的位错

在第二章讨论位错的基本性质时都是结合简单立方结构进行的，这样比较方便，而实际的晶体结构有面心立方，体心立方和密排六方等。在这些晶体结构中的位错，其性质和行为与简单立方结构有相似之处，但也有一些不同，本章着重介绍这些典型晶体中位错的特点。

在实际晶体中，位错的柏氏矢量除了等于点阵矢量(lattice vector)外，还可以不等于点阵矢量，所以根据位错柏氏矢量的不同可以分为单位位错(Unit dislocations)和不全位错(Partial dislocations)。通常把位错的柏氏矢量恰好等于单位点阵矢量的位错称为单位位错。由于这种位错在晶体中运动之后，滑移面上下两部分晶体又恢复成没有缺陷的完整晶体，所以又称为全位错(Perfect dislocatious)。相对来说，柏氏矢量小于点阵矢量的位错称为不全位错。顾名思义，这类位错在晶体中运动以后滑移面上下两部分的原子排列和正常的晶体点阵不一样，而在其后留下了缺陷。因而这样的不全位错不可能单独存在，常常是两个或三个成为一组同时存在。

§1　面心立方晶体中的位错

一、全位错

许多常见金属如铜、银、金、铝、镍及其合金具有面心立方结构。它们的纯金属是软的，单晶体的临界分切应力约为0.1～1 MNm^{-2}。这些材料韧性较好。其变形行为与位错结构密切有关。面心立方晶体中的位错结构较简单立方复杂得多。

面心立方结构中位错可能的柏氏矢量b为$\frac{a}{2}\langle110\rangle$和$a\langle001\rangle$。由于位错能量正比于柏氏矢量的平方$b^2$，位错$\frac{1}{2}\langle110\rangle$的能量只有$\langle001\rangle$的一半，即$2a^2/4$比$a^2$。因此$\langle001\rangle$位错具有更高的能量，事实上是见不到的，因而只有$\frac{1}{2}\langle110\rangle$是面心立方

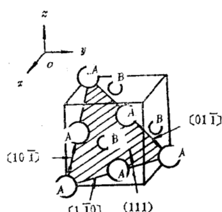


图3-1 面心立方晶体(111)面上的六个滑移方向

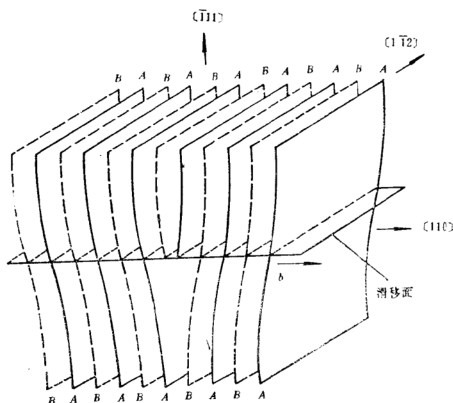


图3-2 面心立方晶体中的单位位错 $\frac{a}{2}[110]$

晶体位错的柏氏矢量。由于这个位错的柏氏矢量等于单位点阵矢量，且位错滑动之后留下的是完整晶体，所以这个位错是全位错。晶体的滑移方向是〈110〉，它一定是在密排面{111}上，图3-1表示（111）晶面上的六个滑移方向也就是可能的六个柏氏矢量：$\frac{a}{2}[10\bar{1}]$、$\frac{a}{2}[\bar{1}01]$、$\frac{a}{2}[01\bar{1}]$、$\frac{a}{2}[0\bar{1}1]$、$\frac{a}{2}[1\bar{1}0]$和$\frac{a}{2}[\bar{1}10]$

图3-2表示面心立方晶体中柏氏矢量为$\frac{a}{2}[110]$的刃型位错。因为(110)面的排列顺序是*ABAB*……，位错运动时，由一层*A*和一层*B*组成的半原子面的位置同时移动才有可能保持*ABAB*……的排列顺序。

二、堆垛层错

完整晶体可以看成由许多相同指数的密排面顺序堆垛而成。面心立方晶体是以密排面{111}按*ABCABC*……的顺序堆垛而成，如图3-3所示。图面为(111)面，*A*字所代表的原子都是处在第一层的原子，*B*字（虚线圆圈）代表第二层原子位置，*C*字代表第三层原子位置，于是可以发现(111)面原子的投影位置每隔两层晶面重复一次。

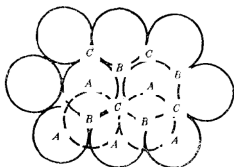


图3-3　面心立方晶体(111)面上的原子排列

为了简明的表示堆垛顺序，除用*ABCABC*……这种表表方法外，还可以用Δ表示*AB*、*BC*、*CA*堆垛顺序，∇表示*BA*、*CB*、*AC*堆垛顺序。因为，面心立方晶体的正常堆垛顺序就可以表示为ΔΔΔΔ……。

晶体中局部区域密排面的正常堆垛顺序如果出了差错，就要出现称为堆垛层错(Stacking fault)或者简称层错的晶体缺陷。显然，这是一种面缺陷。面心立方晶体中的堆垛层错可以有三种方式形成。

(一)抽出一层

图3-4(*a*)表示在正常堆垛顺序中抽去了部分*C*层，则堆垛顺序为 $ABCAB\underset{C}{\uparrow}ABC\cdots\cdots$，或可写成$\Delta\Delta\Delta\Delta\nabla\Delta\Delta\Delta\cdots\cdots$，即在$\nabla$处出现了层错。

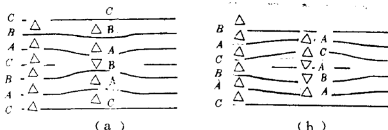


图3-4 面心立方晶体中的堆垛层错

(*a*) 抽出层错； (*b*) 插入层错

(二)插入一层

图3-4(*b*)表示把一层*A*原子插入于*B*层与*C*层之间，其堆垛顺序则成为$ABCAB\underset{A}{\downarrow}CAB\cdots\cdots$，或可写成$\Delta\Delta\Delta\Delta\nabla\nabla\Delta\Delta\cdots\cdots$，这时有两处的堆垛顺序出现了差错。

(三)滑移

堆垛层错也可以通过滑移形成。如在(111)面上的任意一层原子，从原来的*C*位置向〔$2\bar{1}\bar{1}$〕方向滑移到*A*原子层位置（图3-3)，则该层以上的所有原子层也随着移动一位置，即*A*移动到*B*，*B*移动到*C*……，则移动后的堆垛顺序为*ABCABABC*……或者$\Delta\Delta\Delta\Delta\nabla\Delta\Delta\cdots\cdots$，其结果与图3-4(*a*)中的抽去一层的堆垛层错完全相同。

晶体中形成层错时几乎不引起点阵畸变，而只是晶体中的正常周期性和对称性发生了改变。因而需要额外的能量。产生单位面积层错所需要的能量定义为层错能γ。由于各种金属的层错能不同，出现层错的几率相差很大，层错能越高，层错出现的几率越小。应用电子显微镜衍衬法观察层错，可以估计出层错能，实验测得的层错能如表3-1所示。虽然不同实验方法得到的数值差异较大，但铝的堆垛层错能较大，而铜和不锈钢的数值较小的规律却是相似的。

表3-1 面心立方金属层错能的实验值

金　　属	层错能($10^{-7}J/cm^2$)
Au	30，30，24～27
Ag	43，21，26～58
Cu	40，40，40，169
Ni	90，64～140，410
Al	240，170，200
不锈钢	13

用电子显微镜测量层错能的结果表明，固溶合金化将影响层错能，而影响固溶体溶解度的那些因素也影响层错能。例如加10%(原子比)锌到铜中，层错能将降低一半左右(即从$75\times10^{-7}J/cm^2$)降低到$35\times10^{-7}J/cm^2$)。

三、不全位错

若堆垛层错不是贯穿整个晶面，而是在晶体中间某个区域停止了，于是可得到一个层错区和无层错区的边界，边界的一侧有缺陷，另一侧是没有缺陷的完整晶体，这边界区域是不全位错。

根据本章开始时的讨论，这类位错的柏氏矢量小于单位点阵矢量。因层错形成方式不同，面心立方金属有两种重要的不全位错。

（一）肖克莱不全位错

由滑移产生的层错与完整晶体的边界称为肖克莱不全位错。图3-5为肖克莱不全位错形成示意图。图面为$(10\bar{1})$面，图的右边密排面(111)排列完整，A层在C层之上。堆垛顺序为$ABCABC$……。图的左边A层沿着LM在$[1\bar{2}1]$方向滑移到B层位置，堆垛顺序变成了$ABCBCAB$……，因此产生了一个堆垛层错和一个不全位错，后者的柏氏矢量在密排面(111)上，为$b=\frac{a}{6}[1\bar{2}1]$。而(111)面就是滑移面，矢量的大小为$a/\sqrt{6}$。

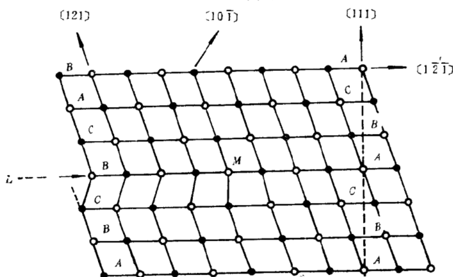


图3-5 沿LM滑移面在M处形成的$\frac{a}{6}[121]$肖克莱不全位错

肖克莱不全位错可以是刃型的、螺型的，或者混合型的。肖克莱不全位错的位错线和柏氏矢量都在滑移面(111)上，所以是可以滑移的。滑移结果是使层错面扩大或缩小。螺型位错不像简

单立方晶体中那样能在任意面上滑移，而只能在具有堆垛层错的面上滑移。

（二）弗兰克不全位错

在完整晶体的{111}面原子层间插入或抽去一层半原子面而形成的层错边界称为弗兰克(Frank)不全位错。图3-6为弗兰克不全位错示意图。图面为$(10\bar{1})$面，图的右边为完整晶体，堆垛顺序为$ABCABCABC$……，图的左边由于抽去了一层B，其堆垛顺序变成为$ABCACABC$……，即出现了一个堆垛层错。在层错区与完整晶体的边界M处出现了不全位错，其柏氏矢量为$\frac{a}{3}\langle 111\rangle$。

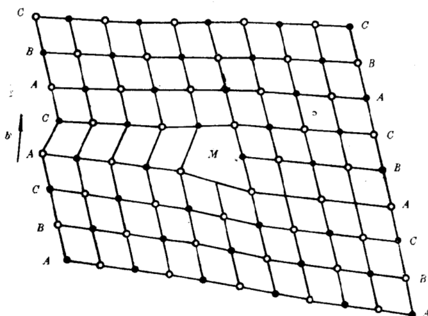


图3-6　抽去一层原子面成$\frac{a}{3}\langle 111\rangle$弗兰克不全位错

由于柏氏矢量垂直于密排面(111)和层错面，所以它是刃型位错。这种位错是不能滑移的，只能攀移，故又称不动位错或固定位错。当空位或间隙原子聚集或扩散到位错附近时，即发生攀移运动。弗兰克不全位错若为抽去一层原子面，即空位聚集成群，崩

塌而成，则为负弗兰克不全位错，如图3-4(*a*)。若为插入一层原子面，如图3-4(*b*)，或者说由间隙原子聚集而成，则为正弗兰克不全位错。

（三）汤普森(Thompson)符号

在描述面心立方结构中的位错状态时，采用Thompson符号是很方便的。现考虑一个面心立方晶格中单晶胞，如图3-7左上

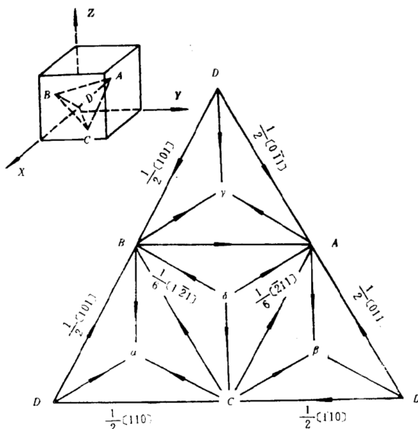


图3-7　Tbompson符号

角所示，以*D*为原点，A、*B*、*C*分别为三个(100)面的中心。联结*ABCD*为一正四面体，显然*BCD*为($\bar{1}$11)面标以(*a*)，其中心为*α*，*ACD*为(1$\bar{1}$1)面，标以(*b*)，其中心为*β*，*ABD*为(11$\bar{1}$)面，标

以(c)，其中心为γ，而ABC为(111)面，标以(d)，其中心为δ。若以ABC面为底，将上述四面体展开，便为图3-7所示的平面图。这样AB、BC等表征$\frac{a}{2}[\bar{1}10]$等全位错。$A\gamma$、$B\gamma$等表征$b=\frac{a}{6}[1\bar{2}1]$等的肖克莱不全位错。至於弗莱克位错的柏氏矢量显然可以写成

$$A\alpha=\frac{1}{3}[1\bar{1}1] \qquad B\beta=\frac{1}{3}[\bar{1}11]$$

$$C\alpha=\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}1] \qquad D\delta=\frac{1}{3}[111]$$

四、扩展位错

在两个不全位错中间是堆垛层错组成的位错称为扩展位错，而扩展位错与位错的合成、分解有关，因此需先了解位错的反应。

（一）位错反应

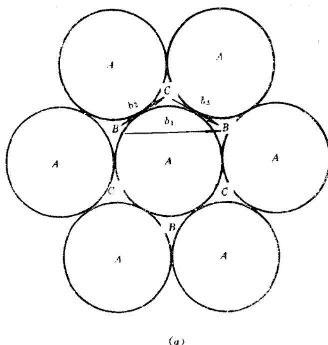
在分别讨论了全位错与不全位错之后，就有可能进一步探讨位错之间相互作用，即位错反应。

假如有一面心立方晶体的单位位错为$\frac{a}{2}[\bar{1}10]$，它可以分解为两个肖克莱不全位错，即：

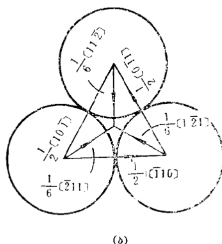
$$\frac{a}{2}[\bar{1}10]\rightarrow\frac{a}{6}[\bar{2}11]+\frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$$

这个位错反应的几何条件显然是可以满足的，因为反应式左边的矢量分量恰好等于右边的有关矢量和。其能量变化为$\frac{a^2}{2}\rightarrow\frac{a^2}{6}+\frac{a^2}{6}$。因此该位错反应可自动进行。由此也可以看到面心立方晶体中的一个全位错可以分解为两个不全位错。

为了对位错反应有更直观的了解有必要进一步分析面心立方晶体的滑移过程。仍以面心立方晶体中的$\frac{a}{2}$〔$\bar{1}$10〕位错为例。图3-8中的图面平行于密排面(111)。圆圈A为图面(111)上的一层原子。B为密排面A层上面一层的原子位置，C为密排面B层上面一层的原子位置。当有切应力存在时，B层原子沿滑移方向〔1$\bar{1}$0〕相对于A层原子滑移，即由B_1滑移到B_2位置。这个滑移之后，晶体仍保持$ABCABC$……的顺序排列。B_1B_2为单位位错的柏氏矢量。从图中可以看出，当原子由B_1运动到B_2位置时，需越过A_1原



(a)



(b)

图3-8 面心立方晶体的滑移

子的顶部，这样的滑移需要有较高的能量。

如果原子由B_1沿A原子间的"山谷"到位置C_1，再经第二个山谷到新的位置B_2，则更容易些。B_1C_1和C_1B_2分别为肖克莱不全位错$\frac{a}{2}[\bar{2}11]$和$\frac{a}{6}[\bar{1}21]$、如图(b)。这样的滑移能量显然要低。因此，全位错分解成两个肖克莱不全位错后，它的滑移运动也分两步完成。

面心立方晶体中的$\frac{a}{2}\langle 110\rangle$型全位错可以分解为两个$\frac{a}{6}\langle 112\rangle$型肖克莱不全位错，由于$b_2$和$b_3$两位错的柏氏矢量相互间既不平行又不垂直(图3-8)而成60°夹角。因而两不全位错之间存在斥力，并要相互分开，它们中间是堆垛层错。形成层错要增加层错能，当不全位错互相间的斥力与层错能平衡时，两肖克莱不全位错线的距离达到平衡尺寸d。这样两个不全位错中间夹堆垛层错的结构就是扩展位错。

根据上述理由，图3-2面心立方全位错也可能分解成图3-9那样的扩展位错，原来相邻的两个半原子面AB要向两侧松弛，两个半原子面处分别有柏氏矢量为b_1和b_2的两肖克莱不全位错。可以看出它们之间有层错存在，相距的距离为d。

扩展位错可以是纯刃型或纯螺型的，也可以是混合型的，它取决于全位错的柏氏矢量与位错线取向的关系。很明显，图3-9中的扩展位错是刃型的。

假如全位错的柏氏矢量$\frac{b}{2}[110]$与位错线的夹角为ϕ，则不全位错的柏氏矢量与位错线的夹角分别为$\phi+\frac{\pi}{6}$和$\phi-\frac{\pi}{6}$。层错宽度d可以用位错之间相互作用力的一般公式来求得。两个不全位错之间的作用力F_x，经过计算得出：

$$F_x=\frac{Gb^2}{8\pi d}\ \frac{2-\nu}{1-\nu}\left(1-\frac{2\cdot\nu}{1-\nu}\cos2\phi\right)$$

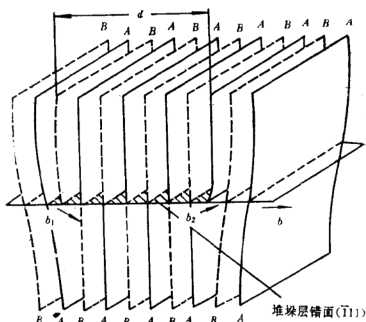


图3-9 单位位错分解成两肖克莱不全位错而形成扩展位错

堆垛层错能γ提供一单位长度位错线上的推力使位错不被排斥开。当F_x与γ相等时，位错的宽度达到平衡值d。所以

$$d=\frac{Gb^2}{8\pi\gamma}\cdot\frac{2-\nu}{1-\nu}\left(1-\frac{2\nu}{2-\nu}\cos2\phi\right) \tag{3-1}$$

由式(3-1)可以看出：层错能低的金属，其位错扩展就宽，如不锈钢和α黄铜；相反层错能高的金属如铝，一般不易看到层错。

为了与示意图3-9相比较，图3-10表示通过计算机模似得到的铜晶体中不全位错周围的原子位置(假设$\gamma=70\text{mJm}^{-2}$)。

(二)扩展位错的运动

扩展位错的运动较全位错复杂，并有它的特点。首先当外加切应力沿全位错的柏氏矢量方向(如〔$1\bar{1}0$〕)作用时，由两个肖克莱不全位错和层错所组成的扩展位错，仍然结合在一起作为一个整体向前滑移。滑移过的区域仍为没有缺陷的完整晶体，但有

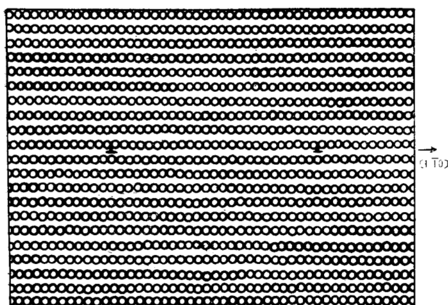


图3-10 模拟铜晶体中纯刃型位错分解成两不全位错后的原子分布图
图面为{112}，垂直于图面方向的位移没有表示出来

$\frac{a}{2}$〔1$\bar{1}$0〕的滑移量。总的效果和全位错完全一样，不同的是扩展位错滑移时，第一个肖克莱不全位错滑移之后形成层错，而第二个肖克莱不全位错滑移之后把已形成的层错去除，恢复为完整晶体。

当切应力τ垂直于单位位错柏氏矢量方向作用时，如沿〔1$\bar{1}$2〕方向，这时作用在两肖克莱不全位错上的力只有沿〔1$\bar{1}$2〕方向的分量才有用，其值为$\pm\frac{a\tau}{2\sqrt{6}}$，因为这两不全位错沿这个方向的柏氏矢量符号相反，所以在这样应力作用下，两个不全位错将沿相反方向移动，即互相靠拢或分开。由于使两个不全位错分开时总的层错能要增加，故要使两不全位错互相无限分开所需的切应力$\tau=\frac{2\sqrt{6}}{a}\gamma$。代入相应数值后，便得$\tau=10^{-2}G$，显然此切应力

过大，故扩展位错在外力作用下始终是以一整体运动的。

1. 束集

已知扩展位错的宽度与层错能成反比，当层错面上局部区域存在杂质、不可动位错或其他障碍时(如图3-11的C点)，使得该

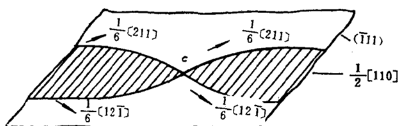


图3-11　扩展位错形成束集

晶面上局部区域的能量增高，则该局部区域的扩展位错宽度要缩小。在极端情况下能缩小成一个节，称为束集(Constriction)。若缩小的不是一个点而是有一定长度的线，则束集后的位错线为全位错，且因该位错线与柏氏矢量平行，所以为螺型位错(图3-12)。

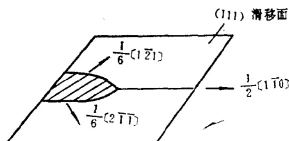


图3-12　扩展位错收缩成螺型位错

形成束集需要能量，它包括以下三个方面：

(1) 为了使两个不全位错间距离减小需要加外力；

(2) 位错线由直线变成弧线而增加的应力场，增加了单位长度位错应变能；

(3) 位错线增长而增加的能量。

由Schoeck和Seeger测得的束集能如表3-2所示。

表3-2 扩展位错的束集能

金　　属	位错类型	能量(eV)
Al	刃　型	0.21
	螺　型	0.11
Cu	刃　型	3.90
	螺　型	0.84

2．扩展位错交割

在变形的某些阶段，很易发生位错的相互交割，图3-13表示两个相互垂直的扩展位错交割的过程。位错只有通过束集形成不扩展的全位错才能彼此交割通过(图b)。然后两扩展位错互相分开，且在扩展位错上产生一割阶(图c)。显然要使扩展位错产生割阶，需要作功以使位错束集。因此割阶的能量取决于堆垛层错能或不全位错间的距离。

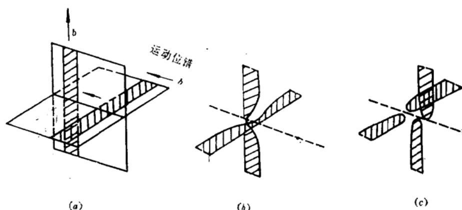


图3-13 扩展位错的交割

(a) 扩展位错彼此相对运动，但有较大距离；(b) 由于领先不全位错的弹性应力场的作用使得位错束集；(c) 在扩展位错处形成割阶

由表3-2可见束集时刃型位错较螺型位错需要更大的能量。但是这并不意味着螺型位错容易交割，因为螺型位错与另一位错相交时束集是容易些，但若与之相交的也是螺型位错，由于形成的割阶难以运动（原因见第五章），因而交割更困难。

3. 交滑移

已知螺型全位错可以交滑移。但当分解成扩展位错后，由于相交的{111}面不可能都是不全位错的滑移面，所以不能交滑移。此外扩展位错分解成两不全位错后不可能就这样转移。如果要进行交滑移，必须要将扩展位错重新束集成全位错。当全位错交滑移到另一滑移

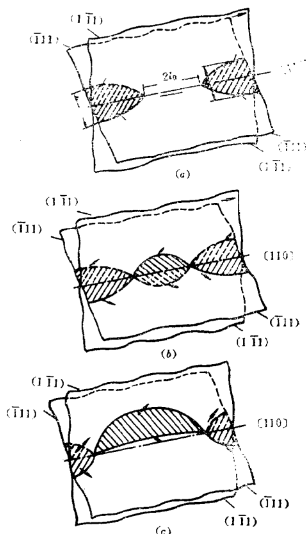


图3-14 面心立方金属的扩展螺型位错从($\bar{1}11$)面交滑移到($1\bar{1}1$)面的三个阶段

(a) $2l_0$长的不全位错束集成单位位错；

(b) 单位位错交滑移到($1\bar{1}1$)面形成新的扩展位错；

(c) 在切应力作用下扩展位错在($1\bar{1}1$)面上弓出

面时它重新分解为扩展位错，如图3-14所示。

一个扩展的$\frac{a}{2}$〔110〕位错位于$(\bar{1}11)$滑移面上(图a)，先在位错线上一点束集，然后在长$2a_0$区域内束集成螺型位错线，其方向平行于〔110〕方向。所以能产生束集是由于在某一局部区域遇到不动位错等障碍。因而外切应力促使两不全位错合并。图3-14(b)中全位错在$(1\bar{1}1)$面上分解成带有堆垛层错的两个不全位错。该面沿〔110〕晶向与原来的滑移面相交，因而具有交滑移的可能。最后在新滑移面$(1\bar{1}1)$上扩展位错在应力作用下继续运动，逐渐把位错全部转移到$(1\bar{1}1)$面上，如图(c)。新扩展位错可在新的滑移面(交滑移面)上自由滑移。在切应力作用下两束集点之间的扩展位错在$(1\bar{1}1)$面上弓出。这样构成了位错开始在$(\bar{1}11)$面上滑移，最后过渡到在$(1\bar{1}1)$面上运动的交滑移。在全部交滑移过程中所需的激活能为

$$E = Ec + 2l_0E_0$$

式中，Ec为束集能，E_0为每单位长度的扩展位错合并为全位错时能量的差值。如果合并成为全位错的长度达不到$2l_0$，则不能在新的滑移面$(1\bar{1}1)$上运动。这与宏观现象中在滑移面上要达到临界切应力才能开始有滑移运动相似。

可见，扩展位错交滑移，比全位错交滑移要困难得多。层错能越低，位错扩展宽度越大，束集越困难，越不易交滑移。相反，层错能高，易于交滑移。这可以解释面心立方金属形变后的位错排列情况。对于低层错能的奥氏体不锈钢，由于很难交滑移，即使在大的形变量下，位错都被限制而排列在滑移面上。对高层错能的铝，由于易于交滑移，形变时使大部分螺型位错通过交滑移排列成小角度晶界。对于中等位错能的Au，Cu，Ni等金属在低形变量时，位错在滑移面上排列，并因与林位错交割形成位错网络；大形变量时，可以发生部分交滑移而出现一些小角度晶界

的位错网络

关于扩展位错的交滑移，除了上述已为大家接受的束集机制外，*Fleischer*还提出一种不需束集的机制，如图3-15所示。其中$(\bar{1}11)$为原滑移面，$(1\bar{1}1)$为交滑移面。$(\bar{1}11)$面上原来有一对不全位错$\frac{a}{6}[12\bar{1}]$和$\frac{a}{6}[211]$。在两滑移面相交为钝角的情况下，领先不全位错$\frac{a}{6}[12\bar{1}]$在到达交线时要进行分解：

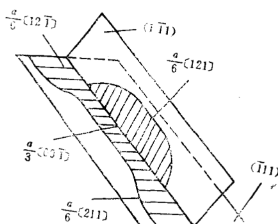


图3-15 Fleischer的扩展位错交滑移机制

$$\frac{a}{6}[12\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[121] + \frac{a}{3}[00\bar{1}] \qquad (3\text{-}2)$$

分解后的肖克莱不全位错$\frac{a}{6}[121]$可在交滑移面$(1\bar{1}1)$上滑移，$\frac{a}{3}[00\bar{1}]$为压杆位错，留在滑移面的交线上。

在外力的继续作用下原滑移面$(\bar{1}11)$上的另一不全位错$\frac{a}{6}[211]$将与$\frac{a}{3}[00\bar{1}]$位错进行反应：

$$\frac{a}{6}[211] + \frac{a}{3}[00\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[21\bar{1}] \qquad (3\text{-}3)$$

式(3-3)形成的肖克莱不全位错$\frac{a}{6}[2\bar{1}1]$与$\frac{a}{6}[121]$位错形成为$(1\bar{1}1)$面上的扩展位错，从而实现了扩展位错的交滑移。

显而易见，按式(3-2)进行反应能量是增高的，所以需要有外界作功。这种交滑移机制较束集机制要省三分之一能量；若交滑移在锐角的相交面上进行，则可省三分之二的能量。

§2 体心立方晶体中的位错

一、全位错

体心立方晶体的金属，例如铁、钼、钽、钒、铬、钨、铌、钾和钠滑移方向通常为<111>，它的全位错的柏氏矢量为$\frac{a}{2}$<111>。但是它的滑移面是不确定的，随成分，温度以及形变速率而变，通常可能的滑移面有{110}、{112}和{123}，如图3-16所示。这些晶面中的任一个都包含<111>滑移方向，因而体立心方晶体共有48个滑移系。因此对螺型位错来说在切应力作用下很容易在不同的{110}面或{112}、{123}面进行交滑移，使滑移线呈波纹形。

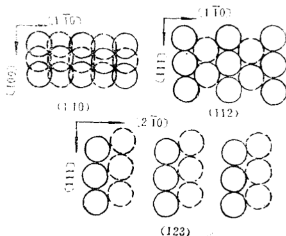


图3-16 体心立方晶体密排面的原子排列，虚线表示下一层晶面的原子

体心立方金属易发生交滑移和试验时很少观察到堆垛层错说

明它的堆垛层错能很高。通常为200～1000mJm^{-2}。因此对位错分解进行简单的弹性计算是不恰当的，关于位错中心结构和行为的知识是通过计算机模拟得到的。对低指数晶面故意产生堆垛层错，然后通过能量计算证实堆垛层错不可能稳定地存在。

近年来对体心立方金属的研究发现了一个有趣的特点，即滑移的不对称性。例如单晶体在单向压缩时的滑移面与在同一方向拉伸时的滑移面不同，也就是说位错在某一方向运动所需的切应力与同一滑移面上的位错往相反方向运动所需的切应力不同。这种现象是不能用$\frac{a}{2}\langle 111\rangle$全位错的运动来解释的。这说明体心立方金属的全位错或者是要分解或者是把位错中心松弛成特殊的非对称结构。只是因为体心立方金属层错能高，扩展位错的宽度较小。

二、堆垛层错

体心立方晶体一般的密排面{110}或{100}都是以$ABABAB\cdots\cdots$方式堆垛，因而不能产生堆垛层错。但是与〔112〕晶向相垂直的晶面的堆垛层错有特殊意义。图3-17表示两个体心立方晶胞和一组$(1\bar{1}2)$面的位置。由图可以看出这些晶面的堆垛顺序为$ABCDEFAB\cdots\cdots$，这些晶面之间的距离为$a/\sqrt{6}$。

若两相邻的{112}面沿〈111〉方向相对位移$\frac{a}{6}\langle 111\rangle$则{112}面的堆垛顺序就发生差错而引起堆垛层错，常见的有以下三种：

（一）滑移

如果在D层{112}晶面以上的晶体相对于下面的晶体作$\frac{a}{6}\langle 111\rangle$的滑移，就可产生如下的堆垛层错

$$\begin{array}{ccccccccccc} A & B & C & D & E & F & A & B & C & D \\ & & & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ A & B & C & F & A & B & C & D & E & F \end{array}$$

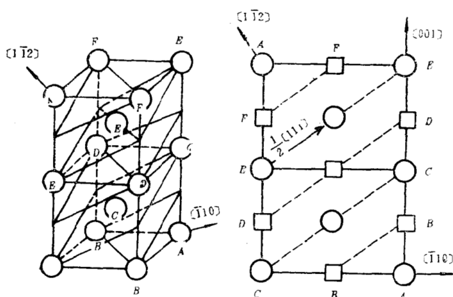


图3-17　体心立方晶体{112}晶面的堆垛顺序

(*a*) 两个晶胞内(1$\bar{1}$2)面上的原子位置；

(*b*) (1$\bar{1}$2)面投影在(110)面上时的原子位置；

○—位于图面上的原子位置；

□—位于图面以上和以下的原子位置

（二）抽出一层

如果在晶体中抽去DE两层{112}晶面(相当于空位聚集)如图3-18(*b*)，则产生如下的堆垛层错



（三）插入一层

如果在CD之间插入DF两层(112)晶面（相当于间隙原子聚集）如图3-18(*b*)，则产生如下的堆垛层错。

$$\begin{array}{l} \quad\ \ \overline{|DE|} \\ \quad\ \ \downarrow \\ A\,B\,C\,D\,E\,F\,A\,B\,C\,D \\ A\,B\,E\,D\,E\,D\,E\,F\,A\,B\,C\,D \end{array}$$

(a) (b)

图3-18 体心立方晶体的堆垛层错

(a) 抽出层错； (b) 插入层错

如果每层{112}面都相对下层的{112}面滑移$\frac{a}{6}$‹111›则就形成如下的孪晶

$$\begin{array}{ccccccccccccc} F&E&D&C&B&A&F&E&D&C&B&A&F \\ &&&&&&&\downarrow&\downarrow&\downarrow&\downarrow&\downarrow&\downarrow \quad \frac{a}{6}\langle 111\rangle \\ &&&&&&&A&F&E&D&C&B \\ &&&&&&&&\downarrow&\downarrow&\downarrow&\downarrow&\downarrow \quad \frac{a}{6}\langle 111\rangle \\ &&&&&&&&B&A&F&E&D \\ &&&&&&&&&\downarrow&\downarrow&\downarrow&\downarrow \quad \frac{a}{6}\langle 111\rangle \\ &&&&&&&&&C&B&A&F \\ &&&&&&&&&&\downarrow&\downarrow&\downarrow \quad \frac{a}{6}\langle 111\rangle \\ &&&&&&&&&&D&C&B \\ &&&&&&&&&&&\downarrow&\downarrow \quad \frac{a}{6}\langle 111) \\ &&&&&&&&&&&E&D \\ &&&&&&&&&&&&\downarrow \quad \frac{a}{6}\langle 111\rangle \\ &&&&&&&&&&&&F \end{array}$$

相当于$FEDCBA\vdots FABCDEF$即以F为中心成对称关系。

三、位错分解

（一）全位错在{110}面上的分解

与面心立方晶体一样体心立方晶体的全位错也可以分解为不全位错。已知体心立方晶体的{110}面是以$ABAB\cdots\cdots$的顺序堆垛的。同面心立方晶体相类似，B层原子沿$[\bar{1}\bar{1}1]$方向的滑移，可被三个运动所代替，如图3-19所示。柏氏矢量为b的单位位错可以分解为b_1、b_2、b_3三个不全位错。如用晶体学符号表示则为

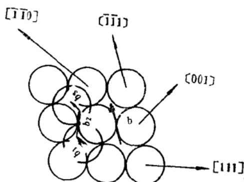


图3-19 $(1\bar{1}0)$面上单位位错$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}1]$的分解

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}1]\rightarrow\frac{a}{8}[\bar{1}\bar{1}0]+\frac{a}{4}[\bar{1}\bar{1}2]+\frac{a}{8}[\bar{1}\bar{1}0]$$

由于这种位错的分解完全发生在$(1\bar{1}0)$滑移面上，所以它是可以滑动的。

也可能发生螺型位错在三个{110}面上的分解，即

$$\frac{a}{2}[111]\longrightarrow\frac{a}{8}[110]+\frac{a}{8}[101]+\frac{a}{8}[011]+\frac{a}{4}[111]$$

由图3-20(a)可以看出三个$\frac{a}{8}\langle110\rangle$位错以$\frac{a}{4}[111]$位错为中心向三个相交的{110}面对称地扩展。很明显，这样的位错是不能滑动

的。图(b)表示三个相交于[111]的{110}面。

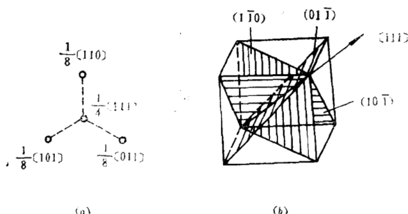


图3-20 {110}面上螺型位错的分解

可以想像得到，在进行上述分解后，得到了不全位错，则在不全位错之间应有层错存在。事实上用电子显微镜在体心立方金属中没有观察到扩展位错，而用一般显微镜观察，能看到波纹状的滑移线，这说明位错容易交滑移。

（二）全位错在{112}面上的分解

在铁等体心立方金属中，它的孪晶面为{112}面，如在{112}面上存在$\frac{a}{6}$<111>的位移则形成机械孪晶，一般认为{112}面上的$\frac{a}{2}$<111>全位错有可能发生如下分解

$$\frac{a}{2}[11\bar{1}] \longrightarrow \frac{a}{8}[11\bar{1}] + \frac{a}{3}[11\bar{1}] \qquad (3\text{-}4)$$

这样分解形成的两个不全位错其间含有堆垛层错，如图3-21所示，形成只有一个原子间距宽的孪晶，由两个孪晶界所隔开。对铁来说，孪晶界能为20erg/cm^2。这时堆垛层错宽度极小，约在1nm以下。

此外，如单位位错线也为[11$\bar{1}$]方向，这个位错是螺型位错，则式(3-4)中的两个不全位错也为螺型位错。由于[11$\bar{1}$]为(112)

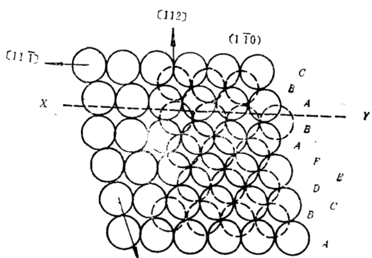


图3-21　体心立方晶体中层错的原子排列

面和($\bar{1}$22)面或者为(112)面和(2$\bar{1}$1)面的交线，不全位错有可能向别的滑移面转移。一般认为这是铁和钼等金属容易得到波状滑移线的原因。

四、不全位错与孪晶的关系

所有体心立方金属在低温或高应变率变形时可以看到变形孪晶。体心立方晶体的孪晶面是{112}，孪晶方向是‹111›。而{112}面的堆垛顺序是*ABCDEFAB*……。若要形成孪晶必须在{112}面上沿‹111›方向产生 $a/\sqrt{2}$ 的均匀切变，这个切变可以通过在每一个{112}面上都相继地有一个$\frac{a}{6}$‹111›的位移来产生。具体的形成过程如图3-22所示。图(a)表示体心立方晶体的(1$\bar{1}$0)面。{112}孪晶面垂直于(1$\bar{1}$0)面，其交线为水平线，晶体的右侧沿x-y有一组孪晶位错，是可滑动的。由图(b)可以看出E层原子因有$\frac{a}{6}$[$\bar{1}\bar{1}$1]的不全位错滑移到A层位置，E层上面的D层则滑移到B层位置……，使晶体最终的堆垛顺序为*EDCBAFABCDE*，也就是形成了孪晶(图c)。

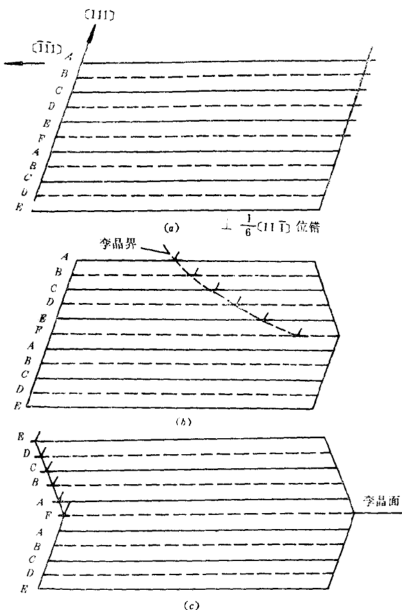


图3-22 体心立方晶体形成孪晶的示意图

(*a*) 图面为(1$\bar{1}$0)面，{112}孪面垂直于(1$\bar{1}$0)，其交线即水平线，*x*-*y*表示有一组$\frac{a}{b}$[$\bar{1}\bar{1}$1]的孪晶位错；(*b*) 当孪晶位错运动到晶体中部时，形成了孪晶，可以看到堆垛顺序有了变化；(*c*) 孪晶位错扫出晶体，形成孪晶

§3 密排六方晶体中的位错

密排六方晶体像镁、锌、镉、钛和铍等的密排面是基面(0001)，密排方向是$\langle 11\bar{2}0\rangle$，单位点阵矢量为$\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$。因此晶体滑移是在(0001)面沿$\langle 11\bar{2}0\rangle$方向运动来实现的，在所有的密排六方金属中都曾观察到这种方式的变形。当在基面上的滑移由于某种原因受到限制时也曾观察到在其它滑移面上的滑移。

一、全位错与不全位错

与面心立方晶体中用汤普森四面体相类似，在密排六方晶体中Berghezen等提出了用双角锥的图形(图3-23)，来表示密排六方晶体中各种位错的柏氏矢量。

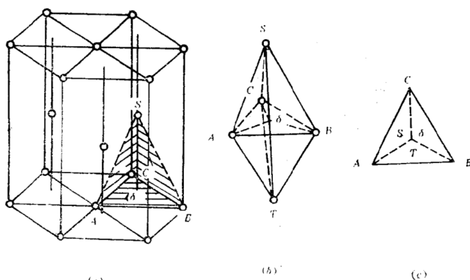


图3-23 密排六方晶体中的位错柏氏矢量

由图可知，有以下几种全位错：

(1)在底面上有柏氏矢量为AB、BC、CA、BA、CB和AC的全位错。可以看出柏氏矢量都沿着角锥底面三角形ABC的边。这

些柏氏矢量也可以用$\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$表示。

(2)柏氏矢量为与底面垂直的ST和TS两个单位位错。这类位错的柏氏矢量用$\langle 0001\rangle$表示。它们的大小等于晶胞高度c。

(3)柏氏矢量为ST和AB向量 和表示的$\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}3\rangle$型单位位错。这样的位错共有12个。这种位错可以简称为$(c+a)$型位错。其中c为晶胞高度，a为点阵常数。

也有以下几种不全位错：

(1)垂直于底面的弗兰克不全位错，以符号σS、σT、$S\sigma$和$T\sigma$表示，柏氏矢量为$\frac{1}{2}\langle 0001\rangle$，其大小为$\frac{c}{2}$。

(2)在底面上的肖克莱不全位错类型的不全位错，以符号$A\sigma$、$B\sigma$、$C\sigma$、σA、σB和σC表示。这种位错的柏氏矢量为$\frac{a}{3}\langle 10\bar{1}0\rangle$。

(3)符号AS、BS、CS、AT、BT、CT等的12条不全位错。这种不全位错是(1)、(2)两种不全位错的组合。它们的柏氏矢量可用$\frac{a}{6}\langle 20\bar{2}3\rangle$来表示。

表3-3列出了密排六方晶体不同类型位错的柏氏矢量**b**方向，柏氏矢量的大小b和位错的相对能量b^2。

表3-3　密排六方晶体中的位错

位错类型	AB	TS	SA/TS	Aσ	σS	AS
$\vec{b}$	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$	[0001]	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3\rangle$	$\frac{1}{3}\langle \bar{1}100\rangle$	$\frac{1}{2}[0001]$	$\frac{1}{6}\langle \bar{2}203\rangle$
b	a	c	$\sqrt{(c^2+a^2)}$	$a/\sqrt{3}$	c/2	$\sqrt{\left(\frac{a^2}{3}+\frac{c^2}{4}\right)}$
b^2	a^2	$\frac{8}{3}a^2$	$\frac{11}{3}a^2$	$\frac{1}{3}a^2$	$\frac{2}{3}a^2$	a^2

二、堆垛层错

在密排六方晶体中有两类抽出型堆垛层错I_1、I_2和一类插入型堆垛层错E存在。

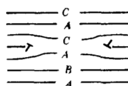
(1)I_1型

已知密排六方晶体的正常堆垛顺序为$ABABABAB\cdots\cdots$，若抽去一层B则成为$ABABAABAB\cdots\cdots$排列。这样有两层A面相邻是不稳定的，能量很高，若在A层以上的各层晶面全部位移$\frac{1}{3}[\bar{1}100]$则成为

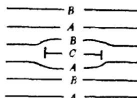
```
A B A B A A B A B
          ↓ ↓ ↓ ↓
          C A C A
```

```
即  A B A B A C A C A
          └───┘
```

因而抽去一层晶面后存在一个次近邻层错(用符号⊔表示)，称I_1型堆垛层错，图3-24(a)为层错的示意图。



(a)



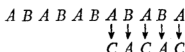
(b)

图3-24　密排六方晶体的堆垛层错

(a) I_1型；　　(b) E型

(2)I_2型

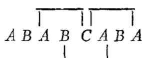
I_2型堆垛层错是由于存在$\frac{1}{3}\langle 10\bar{1}0\rangle$滑移产生的，即



即$ABABABCACAC$，可以看出存在两个次近邻层错，称I_2型堆垛层错。

(3)E型堆垛层错

E型堆垛层错是在A与B层之间插入一层C，即



可以看出存在三个次近邻层错，层错示意图如图3-24(b)所示。

上述层错的存在，使晶体中形成极薄的面心立方堆垛顺序($ABCABC$……)，因而要有额外的堆垛层错能γ。层错能的形成方式不同，其层错能也不一样。大致为：$\gamma_{I1}:\gamma_{I2}:\gamma_E=1:2:3$。对于沿底面滑移的金属其层错能的实验值大致为：Zn、300mJm^{-2}；Cd、175mJm^{-2}；Mg、125mJm^{-2}；Co、16mJm^{-2}。对于沿棱柱面滑移的金属像钛和锆则或者层错能很高或者不可能有层错。

虽然还没有直接的证据可以证明在非密排面也有堆垛层错存在，但非底面滑移的发生和用电子计算机模拟的结果提出了在棱柱面和角锥面有层错存在的可能，虽然层错能可能很高。

三、密排六方晶体的滑移

在铍、镁、镉等金属的滑移系为$\langle 11\bar{2}0\rangle(0001)$，像面心立方金属中的$\langle 1\bar{1}0\rangle\{111\}$滑移系相似，其临界分切应力是较低的($\leqslant$1 MNm^{-2})，并且单位位错可以分解为两个肖克莱不全位错

$$\frac{1}{3}[1120]\longrightarrow\frac{1}{3}[10\bar{1}0]+\frac{1}{3}[01\bar{1}0]$$

这两个不全位错之间为一较狭的堆垛层错带。层错带的宽度，即不全位错间的距离与堆垛层错能γ成反比。

通过滑移产生的堆垛层错见图3-25。如A层在B层上滑移，由于$A\sigma$肖克莱不全位错的作用使原子由位置A滑移到C，后一个肖克莱不全位错σB则使原子由位置C滑移到A。由于位错在滑移面

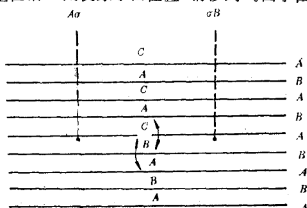


图3-25　AB单位位错分解成两肖克莱不全位错，堆垛层错为Ⅰ$_2$型

上，所以这样的位错是可以运动的。

在非底面的滑移最常见的位错柏氏矢量仍是 $b=\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$。由图3-26可以看出具有$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$柏氏矢量的位错除了在底面滑移外还可以在棱柱面和角锥面滑移。然而，金属中更常见的还是沿底面滑移。因为非底面滑移的分切应力要高1～2个数量级。这可以通过在其它晶面不存在低能层错和位错滑移较困难来解释。

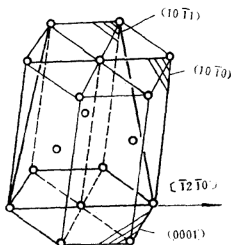


图3-26　密排六方晶体中的三个可能滑移面具有共同的[$\bar{1}$2$\bar{1}$0]方向

参 考 文 献

1. Hull D, Introduction to Dislocation, Pergamon, 1984
2. Nabarr0 F.R.N, Dislocations in Solids, vol2, North-Hllond, 1979
3. Hirth J.P, Theory of Dislocations, Wiley-Interscience, 1982
4. 幸田成康，金属物理学序论，コロナ社，1978
5. 哈宽富，金属力学性能的微观理论，科学出版社，1983
6. 赖祖涵，金属的晶体缺陷与力学性质，冶金工业出版社，1988
7. 刘国勋等，金属学原理，冶金工业出版社，1980
8. Hassen P, 物理冶金学，肖纪美等译，科学出版社，1984

习题及思考题

1-1，如果在面心立方晶体中有一完全位错，其柏氏矢量为$\frac{a}{2}[\bar{1}10]$，并且位于{111}晶面上，试指出它可能分解成的所有各对肖克莱不全位错的柏氏矢量。

1-2，举出面心立方点阵中的位错与简单立方点阵中位错的三个不同点。

1-3，若已知一面心立方晶体堆垛层错能为1×10^{-6}J/cm³，剪切模量为10^{6}N/cm³，点阵常数为0.3nm，泊桑比为1/3，试确定$\frac{a}{6}[11\bar{2}]$和$\frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$两个不全位错之间的平衡距离。

1-4，为什么在密排六方晶体中$\frac{c}{a}$比值大的晶体，滑移多半在底面上进行？而$\frac{c}{a}$比值小的晶体，滑移多半在棱柱面或棱锥面上进行？

第四章　面缺陷的基本性质

面缺陷是指两个方向尺寸较大，一个方向尺寸较小的缺陷。通常是几个原子厚的区域，在这个区域内的结构和性能不同于晶体的内部。

§1　小角度晶界

一般将两晶粒的位向差小于10°的晶界称为小角度晶界。它又可分为两类，即倾斜晶界和扭转晶界。倾斜晶界是指晶界两侧的晶体相互倾斜了一个小角度。根据晶界两侧晶体原子的排列情况又可分为对称倾斜晶界和非对称倾斜晶界。

一、对称倾斜晶界

最简单的晶界是对称倾斜晶界，见图4-1。该图为简单立方

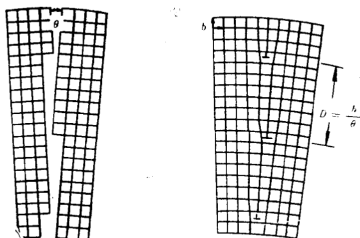


图4-1　对称倾斜小角度晶界

结构，界面为(100)面。它是由一系列柏氏矢量为[100]相隔一定距离的刃型位错垂直排列而成的，其两侧的晶体有位向差θ，相当于晶界两边的晶体绕平行于位错线的轴各自旋转了一个方向相反的$\frac{\theta}{2}$角而成的，所以称为对称倾斜晶界。这种晶界只有一个变量θ，是一个自由度晶界。晶界中位错的间距D，位向差θ和柏氏矢量b之间应满足下列关系：

$$D=\frac{b}{2\sin\frac{\theta}{2}}$$

当θ值很小时，

$$\frac{b}{D}\approx\theta \qquad (4\text{-}1)$$

实验已经证明倾斜晶界的存在，许多研究者应用缀饰法和电子显微镜薄膜透射法，都观测到了这类晶界。

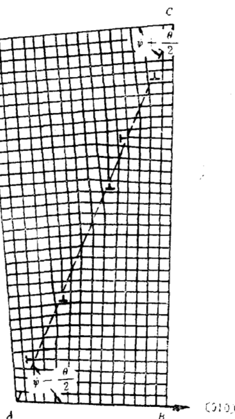


图4-2 非对称倾斜小角度晶界

二、非对称倾斜晶界

实验晶界中普遍存在的是非对称倾斜的小角度晶界。由图 4-2 可见非对称倾斜晶界也是由平行的刃型位错排列构成，但它是由两组柏氏矢量分别为[100]和[010]的刃型位错来表示。此外倾斜晶界的界面不是(100)面，而是任意的(hkl)面。设(hkl)面与[100]方向的夹角为ϕ，两晶粒位向差为θ，则沿AC单位距离上两组位错的数目 n 分别是

$$n_{\perp} = \frac{EC - AB}{b_{\perp} \cdot AC} = \frac{1}{b_{\perp}}[\cos(\phi - \frac{\theta}{2}) - \cos(\phi + \frac{\theta}{2})]$$

$$= \frac{2}{b_{\perp}} \sin\frac{\theta}{2} \sin\phi \approx \frac{\theta}{b_{\perp}} \sin\phi \qquad (4\text{-}2)$$

$$n_{\vdash} = \frac{BC - EA}{c_{\vdash} \cdot AC} = \frac{1}{b_{\vdash}}[\sin(\phi + \frac{\theta}{2}) - \sin[\phi + \frac{\theta}{2})]$$

$$= \frac{2}{b_{\vdash}} \sin\frac{\theta}{2} \cos\phi \approx \frac{\theta}{b_{\vdash}} \cos\phi \qquad (4\text{-}3)$$

因此两组位错的间距分别为

$$D_1 = \frac{b_{\perp}}{\theta \sin\phi} \qquad (4\text{-}4)$$

$$D_2 = \frac{b_{\vdash}}{\theta \cos\phi} \qquad (4\text{-}5)$$

三、扭转晶界

另外一种小角度晶界为扭转晶界。图4-3(a)表示将一个晶体沿中间切开，然后将右边的晶粒 2 绕y轴旋转 θ 角，再与左 边 的

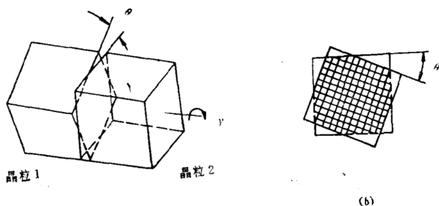


图4-3　扭转晶界形成模型

晶粒 1 会合在一起形成图 (*b*) 所示的晶界。它是由两组螺型位错组成，具体的原子排列见 图 4-4。这是简单立方晶体中的扭转晶

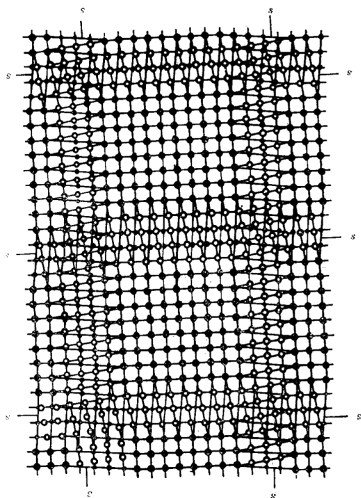


图4-4 简单立方晶体的扭转晶界

界的示意图，其旋转轴是[001]，扭转晶界是(001)面，即纸面。这个晶界包含两组螺型位错，其中一组平行 于 [100]，另一组平行 于 [010]。在螺型位错所包围的中间部分是接合良好的区域。同样可以证明，各组位错的间距仍是$D = b/\theta$。

对称倾斜晶界和扭转晶界是小角度晶界中最简单 的 两 种 形

式。实际的晶界都更为复杂。因为一般小角度晶界的旋转轴和界面可以有任意的位向关系，所以一般是由刃型位错和螺型位错组合而成。

和简单立方结构一样，面心立方晶体的对称倾斜晶界也是由一组平行排列的刃型位错构成，见图 4-5。由图可见刃型位错的柏氏矢量为$\frac{a}{2}[1\bar{1}0]$，晶界所在的平面为$(1\bar{1}0)$。因为位错线在滑移面和晶界面的交线上，现在滑移面为(111)面，所以位错线方向$\vec{u}$为$[11\bar{2}]$。

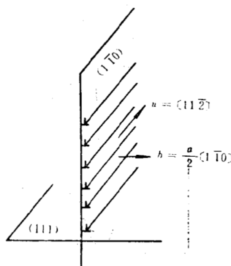


图4-5　面心立方晶体中的对称倾斜晶界

四、小角度晶界位错模型的Frank公式

简单的倾斜晶界和扭转晶界都只有一个自由度。但一般的晶界应有五个自由度，即位向差θ的一个自由度，产生位向差的旋转轴的两个方向余弦，另外晶界法线的两个方向余弦，这是用来表示晶界在空间的取向的。

(一) Frank公式

假如知道晶界的参变量：位向差θ，旋转轴U，晶界的法线方向n和晶体类型就能够确定晶界的位错模型，或者反过来由给定的位错结构求晶界的位向。Frank于 1950 年提出了一个简单的方法来确定适当的位错结构。

图4-6(a)表示一晶界。将单晶体在一任意面上切开，拿开切下的楔块状晶粒，并旋转一角度后再放在晶体上，就形成了如图

所示的晶界。晶粒位向差用矢量表示为：$\omega = u\theta$。图中 u 表示平行于晶界旋转轴的单位矢量。因为旋转轴方向 u 一般与界面成任意角度，所以这样的晶界既包含倾斜成分又包含扭转成分。

图4-6(b)表示晶界平面上有一组平行位错线（有可能不止一

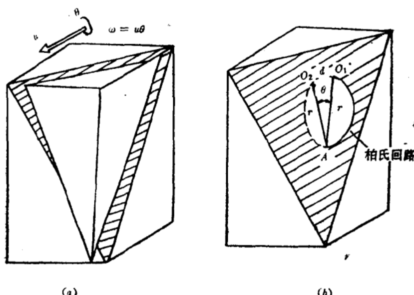


图4-6 五个自由度晶界的位错模型

(a) 晶界位向差； (b) 晶界上的位错和柏氏回路

组，现在图中只表示出一组）。在晶界上选择任意矢量 $AO(\gamma)$。显然，楔块状的晶粒上也有该矢量，但因有$\omega = u\theta$转动，使γ变成为γ'，或者说当不存在位向差时，γ和γ'应重合在一起。为了确定晶界和位错结构现作一柏氏回路。由矢量γ'的一端O_2，经过第一个晶粒然后经过γ和γ'的共同起点A，再经过第二个晶粒回到γ的顶端O_1。假如没有位向差，这样的回路必然是封闭的，但现在就不是闭合的了，尚差一个矢量$\boldsymbol{d}$，它相当于界面上和 AO 相交的各位错柏氏矢量的总和，其值为

$$d = 2(r \times u) \times \sin\frac{\theta}{2} \approx (r \times u)\theta \qquad (4\text{-}6)$$

或 $$d=\sum_i N_i b_i \qquad (4\text{-}7)$$

式中，N_i为与γ相交的拍氏矢量为b_i的位错数。

式(4-6)和(4-7)称为Frank公式，可用来确定任意小角度晶界的位错结构，但有几点应当指出：① 该式只适用于基本上平的晶界且没有长程应力的情况，即弹性畸变只限于位错附近的区域。② 对于已给定晶体和晶界位向的材料来说该式不能唯一地确定位错的存在和位错的形式。位错有多种存在和分布的可能，最可能的是能量最低的一种。譬如简单立方晶体中旋转角为8°的的对称倾斜晶界在本质上与旋转角为82°的完全一样，但前者显然是晶界能较低的一种。③ 晶界上给定一组位错的密度与位向差θ成正比。④ 当晶界含有几组不同柏氏矢量的位错时，每组位错线认为是直线的、等距离的和相互平行的。

(二)Frank公式的应用

1. 假如晶界只含有一组位错，每个位错的柏氏矢量为**b**，则式(4-6)和(4-7)成为

$$N\mathbf{b}=(\mathbf{r}\times\mathbf{u})\theta \qquad (4\text{-}8)$$

显然，**b**垂直于**r**和**u**，因为晶界上**r**的方向是任意的，**b**平行于**n**，而u垂直于**n**。当选择**r**平行于u时，$\mathbf{r}\times\mathbf{u}=0$，这时没有位错与**r**相交，位错平行于旋转轴$u$。因此，该晶界为纯刃型位错组成的对称倾斜晶界。

如取**r**垂直于u和n，则$\mathbf{r}=(\mathbf{u}\times\mathbf{n})|r|$。式(4-8)变为

$$N\mathbf{b}=[(\mathbf{u}\times\mathbf{n})\times\mathbf{u}]|r|\theta=\mathbf{n}|r|\theta$$

因为$\mathbf{b}=|b|\mathbf{n}$，所以位错间距D为

$$D=\frac{|r|}{N}=\frac{|b|}{\theta}$$

与式(4-1)相吻合。

图4-1的对称倾斜中，$u=[001]$，$n=[100]$，当r位于[001]方向时，$\mathbf{r}\times\mathbf{u}=0$，表明位错均平行于[001]。当$\mathbf{r}$位于[010]方向时，$\mathbf{r}\times\mathbf{u}=[100]$，表示位错的柏氏矢量$\mathbf{b}=[100]$，位错间距为$b/\theta$。

2．假如晶界含有两组位错，其柏氏矢量分别为b_1和b_2，且两者不平行，则 Frank 公式可表示为

$$N_1\mathbf{b}_1+N_2\mathbf{b}_2=(\mathbf{r}\times\mathbf{u})\theta \tag{4-9}$$

将上式两侧点乘以$(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)$，得到

$$(\mathbf{r}\times\mathbf{u})\cdot(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)=0$$

即

$$\mathbf{r}[\mathbf{u}\times(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)]=0 \tag{4-10}$$

由于r在晶界上的方向是任意的，$[\mathbf{u}(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)]$总是平行于$\mathbf{n}$，即$(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)$和$\mathbf{u}$都位于晶界平面上，为纯倾斜晶界。如选择$r$平行于$u$，式(4-9)右侧为零，因此两组位错平行于$u$，它们的位错密度可由设定$r$垂直于$u$得出，即$r=(u\times n)r$，因此式(4-9)可写成

$$N_1\mathbf{b}_1+N_2\mathbf{b}_2=\mathbf{n}r\theta \tag{4-11}$$

将上式两侧叉乘b_2，得到

$$N_1(b_1\times b_2)=(\mathbf{n}\times\mathbf{b}_2)r\theta$$

两侧再点乘以$(b_1\times b_2)$得

$$N_1|\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2|^2=(\mathbf{n}\times\mathbf{b}_2)\cdot(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)r\theta$$

$$=\mathbf{n}\cdot[\mathbf{b}_2\times(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)]r\theta$$

一组柏氏矢量为b_1的位错间距为

$$D_1=\frac{r_1}{N_1}=|\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2|^2/\{\mathbf{n}\cdot[\mathbf{b}_2\times(\mathbf{b}_1\times\mathbf{b}_2)]\}\theta \tag{4-12}$$

同样，另一组柏氏矢量为b_2的位错间距为

$$D_2 = \frac{r_2}{N_2} = |\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2|^2 / \{\mathbf{n} \cdot [\mathbf{b}_1 \times (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_1)]\}\theta \quad (4\text{-}13)$$

图4-2的非对称倾斜晶界就是这种形式。由图可知，$b_1=[100]$，$b_2=[010]$，$b_1 \times b_2=[001]$，$n=[\sin\phi, -\cos\phi, \theta]$，代入式(4-12)和(4-13)，则得到

$$D_1 = \frac{b}{\theta \sin\varphi}, \qquad D_2 = \frac{b}{\theta \cos\varphi}$$

与式(4-4)和(4-5)相吻合。

§2 大角度晶界

大角度晶界的结构很难用位错模型来描述。从小角度晶界的计算公式可知，随两晶粒间位向差的增大，位错间距变小。当位向差为10°～15°时，位错间距约为0.3nm左右。相邻位错 的核心区实际上重叠在一起，失去了单个位错的物理意义。所以小角度晶界的位错模型应用到大角度晶界是有困难的。

一、重合位置点阵

实验证明，两晶粒的位向差为某一个或几个特殊的角度时，晶界的性能与其它任意位向差时有很大差别，如晶界能低，原子的迁移速率也较低。为了解释这些特殊晶界的性能，Brandon提出了大角度晶界的重合位置点阵（Coincidence Site Lattice)模型，简称CSL。

若将可无限延伸的两个具有相同阵点的简单立方 晶 体 中 一个，相对于另一晶体绕某一低指数的晶轴旋转某特殊角度时，这两个晶体点阵中一些阵点会重合起来。这些重合位置的阵点在空

间将构成三维空间的超点阵，称为重合位置点阵。

如图4-7，假设在二维的立方点阵中有两个晶粒——晶粒 1

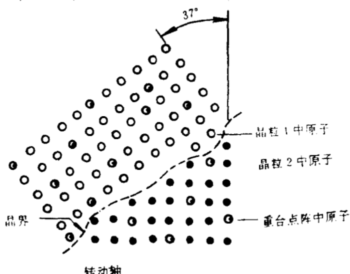


图4-7　两排邻晶粒位向差为37°时的1/5重合位置点阵

和晶粒 2 彼此相邻，且晶粒 2 相对于晶粒 1 绕垂直于二维点阵面上的轴旋转了 37°。可以看出，不受晶界存在的影响，从晶粒 1 到晶粒 2 两个晶粒有1/5的原子位于另一晶粒点阵的延伸位置上，也就是有 1/5 的原子处于重合位置。把这些重合的位置取出来能构成一个比原来晶体点阵大的新点阵，这个点阵就称为重合位置点阵。由于有1/5的原子处于重合位置，所以称这种点阵为1/5重合位置点阵。

图4-8表示体心立方晶体绕[110]轴旋转了 50.5° 后，两晶粒原子排列的二维模型。图中 [110] 轴垂直于图面，黑圈表示相邻晶粒的点阵延伸后的重合原子位置，它构成一个新的点阵，就是重合位置点阵。在图 4-8 的具体情况下，重合位置的原子为晶体总原子数的1/11。这一比例称为重合位置密度。经旋转而产生较大位向差的两晶体相当于两晶粒，其交接处是晶界位置。如果晶界上包含重合位置较多，晶界上原子排列畸变的程度就越小，晶

界能越低。所以晶界力求和重合位置点阵的密排面重合，如图中的 AB 和 CD。若晶界面和重合位置点阵的密排面偏离一不大的角度时，晶界力求把大部分面积和重合位置点阵的密排面重合，而在重合位置点阵的密排面之间出现台阶（图中 BC 部分）。偏离的角度越大，台阶就越多越密。

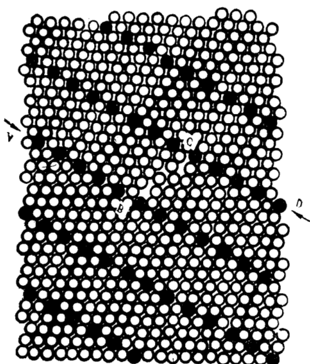


图4-8 两体心立方晶粒相对[110]轴旋转50.5°后出现1/11重合位置点阵

为了说明两个晶体外延点阵中阵点的重合情况，常采用重合位置倒易密度Σ这一概念，它是 CSL 晶胞体积与晶体点阵晶胞体积之比，即

$$\Sigma = \frac{CSL\text{晶胞体积}}{\text{晶体点阵晶胞体积}}$$

显然，$\frac{1}{\Sigma}$就是重合位置密度，它表示CSL阵点数占晶体点阵的阵点数的分数。

对于两个立方晶体，当绕晶轴 $[uvw]$ 旋转θ角时，Σ和θ可按下式计算

$$\Sigma = x^2 + (u^2 + v^2 + w^2)y^2$$

$$\theta = 2\text{tg}^{-1}[y/x(u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}}]$$

式中x和y是两个没有因子的整数，求得的$\sum$如为偶数则要连续除以2，直到得到奇数值为止。

例如体心立方晶体的两部分相对[110]轴转动50.5°，构成重合位置点阵，此时$u^2+v^2+w^2=1^2+1^2+0=2$，

即 $\sum=x^2+2y^2$

$$\because\quad \theta=2\text{tg}^{-1}\left(\frac{y}{x}\sqrt{u^2+v^2+\omega^2}\right)=2\text{tg}^{-1}\left(\frac{y}{x}\sqrt{2}\right),$$

以$\theta=50.5°$代入

则 $$\frac{y}{x}=\frac{1}{3}$$

$$\therefore\quad \sum=3^2+2\times1=11$$

表4-1列出了各类晶体中重要的重合位置点阵的晶轴，要求转动的角度和重合位置密度。

重合位置点阵的晶界必然要出现台阶，但这些台阶不能过多过大，否则晶界的能量将比原子任意排列的平直晶界还要高。因此在重合位置点阵模型的晶界上有许多周期性的结构单元。图4-9表示具有结构单元的37.8°对称倾斜晶界。结构单元由七个原子构成（六个画斜线的，另一个在中心），画斜线的区域可以认为是两晶粒的过渡结构，而中心的实际上就是重合位置点阵的原子。

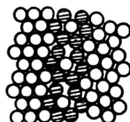


图4-9 具有结构单元的37.8°对称倾斜晶界

进一步分析这些结构单元可以看到在这些结构单元中重合位置点阵原子的附近有许多小的坎，其周期与结构单元相同。图4-10为面心立方晶体绕〈001〉轴旋转38°的重合位置点阵倾斜晶界的示意图。图中的黑点为重合位置点阵原子。AC为坎，AB为坎长，BC为坎高。显然，坎小时，Σ也小，坎中错配

表4-1 各类晶体中的重要重合位置点阵

晶体结构	旋转轴	转动角度 θ	重合位置密度 $\frac{1}{\Sigma}$
体心立方	[100]	36.9°	$\frac{1}{5}$
	[110]	70.5°	$\frac{1}{3}$
	[110]	38.9°	$\frac{1}{9}$
	[110]	50.5°	$\frac{1}{11}$
	[111]	60.0°	$\frac{1}{3}$
	[111]	38.2°	$\frac{1}{7}$
面心立方	[100]	36.9°	$\frac{1}{5}$
	[110]	38.9°	$\frac{1}{9}$
	[111]	22.0°	$\frac{1}{7}$
	[111]	38.2°	$\frac{1}{7}$
六方点阵 ($c/a=\sqrt{8/3}$	[001]	21.8°	$\frac{1}{7}$
	[210]	78.5°	$\frac{1}{11}$
	[210]	63.0°	$\frac{1}{11}$
	[001]	86.6°	$\frac{1}{17}$
	[001]	27.8°	$\frac{1}{13}$

原子也少，所以晶界能也低。

尽管两晶粒间有很多位向能出现重合位置点阵，但这些位向毕竟是特殊位向，不能包括两晶粒的任意位向。为了进一步探讨通常两晶粒具有的任意位向差晶界，对这个模型作了补充：如果

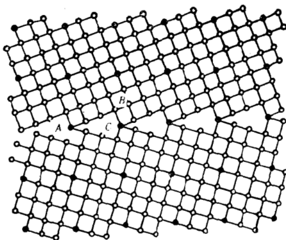


图4-10　面心立方晶体中，绕〈001〉旋转38°的重合位置点阵倾斜晶界，黑点为重合位置点阵原子

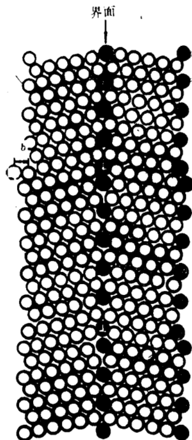


图4-11　以重合位置点阵密排面为晶界，并迭加上重合位置点阵的小角度晶界

两晶粒的位向稍偏离能出现重合位置点阵的位向，可以在界面上加入了一组重合位置点阵位错，即该晶界也同时是重合位置点阵的小角度晶界。这时两晶粒的位向可以从原来出现重合位置点阵的特殊位向扩展一定范围。根据小角度晶界的概念，这个范围可从原来的特殊位向扩展10°。于是，重合位置点阵模型可以解释大部分任意位向的晶体结构。图4-11为两晶粒位向稍微偏离重合密度为1/11的特殊位向的晶界。由图可以看出在界面上加入了一组重合位置点阵的刃型位错，用符号⊥表示，柏氏矢量为 b，因一般为不全位错，故有次位 错 (Secoudary dislocation) 之称。也就是说，在原来重合位置点阵密排面为晶界的基础上又叠加了重合位置点阵的小角度晶界，从而构成了两晶粒的大角度晶界。

由图4-12可以进一步看出大角度晶界中引入次位错后的几何

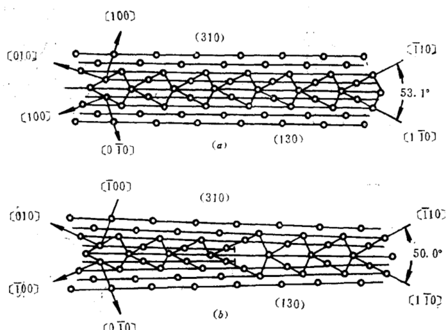


图4-12 (*a*) $\theta = 53.1°$时的对称重合位置点阵倾斜晶界
(*b*) $\Delta\theta = 3.1°$时次位错结构的示意图

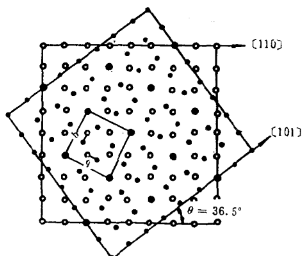


图4-13 旋转角度为36.9°时，面心立方晶体中(001)面的重合位置点阵扭转晶界

图形差别。其中图(*a*)为位向差$\theta = 53.1°$时的对称重合位置点阵倾斜晶界。很明显坎高都是2，所以晶界结构为…|222|…。图(*b*)为引入次位错时的情况，⊥处为刃型位错。θ为50.0°，即$\Delta\theta = 3.1°$。其晶界结构为……|22322|……，很明显次位错出现在坎长为3的长坎处。

重合位置点阵除了上述的倾斜晶界外，同样也有扭转晶界。图4-13为面心立方晶体中的(001)面重合位置点阵扭转晶界，即当旋转角$\theta=36.9°$时所得的重合位置点阵晶界，其中重合位置(大黑点)的数目相当于总格点数的1/5，即$\Sigma=5$。表4-2给出了

表4-2 (001)面重合位置点阵扭转晶界的Σ值和有关参数

Σ	θ°(理论)	θ°(观察)	b(理论)	b(理论nm)	观察结果
1	0	0	$\frac{a}{2}\langle 110\rangle$	0.289	观察到位错网
5	36.9	37.0±0.7	$\frac{a}{10}\langle 310\rangle$	0.129	观察到次位错网
13	22.6	22.5±0.2	$\frac{a}{26}\langle 510\rangle$	0.080	观察到次位错网
17	28.1	28.4±0.5	$\frac{a}{34}\langle 530\rangle$	0.070	次位错网不明显
25	16.3		$\frac{a}{50}\langle 710\rangle$	0.058	观察不到次位错网

五个(001)面重合位置点阵扭转晶界最小的Σ值和对应的各有关参数。

总之，大角度晶界的重合位置点阵模型是一个涉及到几个原子层厚的“匹配—错配结构”。从能量的观点看，重合位置点阵晶界力求与晶体的密排方向一致，如果晶界的旋转角不能满足这一要求，势必需要引入一定数量的次位错。如果晶界本身位向不能满足这一要求，势必需要在晶界上产生一定数量的台阶和坎，使其最大限度的同密排方向一致。

§3 其他的晶界模型

尽管已经介绍了小角度晶界的位错模型，和大角度晶界的重

合位置点阵模型，但有些学者还提出了一些其他的晶界模型，如平面匹配模型，旋错模型和*O*点阵理论等。了解这些模型对进一步理解晶界结构是有帮助的。

一、*O*点阵理论

Bollmann研究了晶界两边晶粒阵点之间的匹配后提出了*O*点阵的概念。他用几何学的方法来描述互相穿插点阵中阵点的最近邻关系。因此这一理论既适用于晶界也可用于相界的研究。在大角度晶界的重合位置点阵模型中，利用*O*点阵理论可以建立重合位置点阵，确定晶界的位向以及与理想的重合位置点阵偏离时，晶界中次位错网络的柏氏矢量。最近有人用电子衍射及高分辨电子显微技术研究了大角度晶界的周期结构，获得了*O*点阵理论的一些实验证据。

*O*点阵的结点是这样的点：在点上看各自晶格的近邻关系是相同的，只差一个转角。图4-14就是两个相同简单立方点阵的(001)面绕[001]旋转28.1°，$\sum=17$。*O*点阵就是图中方形网格的结点，它不一定是原子占据的点。图中显示出三种*O*点阵结点周围的近邻关系，可很清楚的看出各自点阵的阵点近邻关系是相同的，只差一个旋转角。而这些结点都可以做为转换的原点。因此*O*点阵就是所有可能的原点组成的点阵，从该原点出发，使一个点阵经过非退化均匀的线性转换可产生另一点阵。

这个例子也说明重合位置点阵的结点也包括在*O*点阵中。另外*O*点阵中的点阵间距随位向差作连续变化，而重合位置点阵是不连续变化的。*O*点阵的结点就是两个点阵匹配最好的点；相对而言，两个*O*点阵结点中间的部分就是两个点阵匹配不好的区域。

二、旋错

小角度晶界位错模型已很好地被人们所接受，位错可以观察

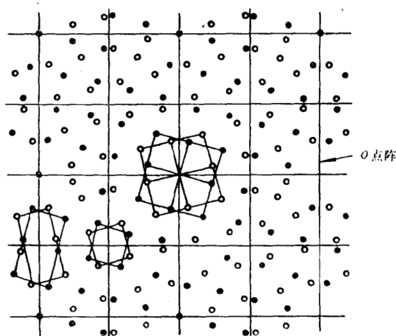


图4-14　两个相同立方点阵的(001)面绕[001]旋转28.1°，$\Sigma=17$ 的扭转晶界，黑点属于点阵1，白圈属于点阵2，方形网格是O点阵

得到，它们的柏氏矢量可以决定，位错间的距离可以测量，晶界能与位向差之间的关系已被理论与实验所证实。显然对于大角度晶界位错模型远远不能满足。当位错之间的距离较小时，晶界结构变得模糊不清，柏氏矢量可有很多种选择。更有甚之，位错模型有时完全被排除在外。如对孪晶界或者重合位置晶界来说，在那种情况下，在晶界处的原子匹配得很好根本没有位错。

然而，大角度晶界的结构确实不是均匀的，如晶界扩散时就不是各向同性的。这种不均匀性必然引入弹性应力场，这种应力场要扩展到晶界厚度范围。虽然适当选择位错的分布或许可以描述它们，但是现在有人提出可用旋错(disclination)来解释，其主要理由为旋错是一种旋转缺陷，而位错是平移缺陷。由于晶界属于旋转缺陷，所以用旋错来描述更为简化。

旋错在1930年即由Volterra提出，但一直未被人所重视，在70年代之后人们才开始注意。

与位错可分为刃型位错和螺型位错相似，旋错也可分为楔型旋错(Wedge disclinations)和扭型旋错（twist disclination）两种。

当旋转轴平行于旋错线时（图4-15)称为楔型旋错。图(a)中O为旋转轴，同时也是旋错线，ω为旋转角或旋错的强度（相当于位错的柏氏矢量b)。应当注意与刃型位错（图b）相比O到p的各点位移是逐渐增加的，而刃型位错时O'到p'的各点位移是相同的，皆为b。

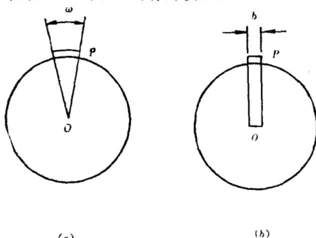


图4-15　楔型旋错与刃型位错相比较
（a）楔型旋错；（b）刃型位错

当旋转轴垂直于旋错线时（图4-16）称为扭型旋错。图（a）

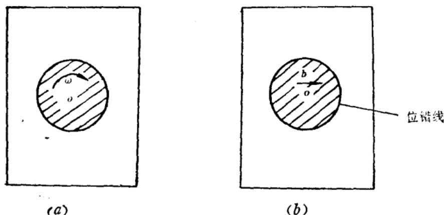


图4-16　扭型位错与切变位错的比较
（a）扭型旋错；（b）切变位错

中画斜线部分为已旋转区域，其余为未旋转区域，已旋转区与未旋转区的边界为圆形旋错线。ω为旋转角或旋错的强度，O为旋转轴。图(b)为切变位错圈，画斜线部分为已滑移区，其余为未滑移区。已滑移区与未滑移区边界为圆形位错线。这种滑移位错用柏氏矢量b来表征。

不论是小角度晶界还是大角度晶界都可以应用旋错模型。图4-17为由旋错形成的对称倾斜晶界。由图4-1知道刃型位错模型时，位向差$\theta=b/D$。而由楔型旋错形成对称倾斜晶界时，每个位错转换成楔型旋错可得位向差$\theta=2L\omega/H$。式中ω为旋错强度，$2L$为楔型旋错高度，H为楔型旋错间距。旋错模型的优点是明显的：不再需要有柏氏矢量概念，旋错的旋转轴是两晶粒共有的方向，晶界能较低。

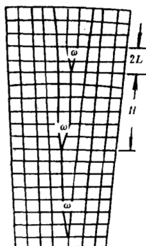


图4-17　由楔型旋错形成的对称倾斜晶界

与位错相类似现有的研究者已经可以计算出旋错的主要参数，如能量和应力场。

§4　相界模型

若相邻晶粒不仅位向不同而且晶体结构和成份也不相同，即它们是不同的相，则它们之间的界面称为相界面。相界面在金属的许多实际问题中有着极其重要的作用。对于相变及多相合金的性能，如脆性都有直接的影响。所以可以说研究相界面的意义绝不亚于晶界，但这方面的研究工作还不够。目前对于相界的性质还只有较粗浅的了解，如按理讲相界应有较高的界面能，但实验

证明，相界能总是小于任一相的晶界能。

一、相界

按照原子在界面上排列的不同，可把相界分为三种形式：

(一)共格界面

当以界面为边界的两个相的原子排列完全一一对应时的界面称为共格界面(coherent interfaces)，见图4-18。可以看出相界面上的原子为两相所共有，两相的晶面在相界面上是连续的，虽然可能有位向的改变。只有当两相的点阵参数几乎相同时才有可能形成这类相界面。除了一些孪晶和马氏体晶界外，两相合金只有在下述情况下才有可能形成这类界面：

1．两相具有相同的晶体结构和结晶位向，例如一面心立方相嵌入另一面心立方相，Al-Cu合金中的析出相(*GPI*相)与基体在某些方向就是成为共格界面。

2．两相具有不同的晶体结构，但有一晶面是共同的，例如钴相变时面心立方晶体的{111}面与密排六方晶体的{0001}基面相平行就是这一类。

假如两相沿某一方向具有相同的点阵参数，则共格界面有可能无限长。但事实上这是不可能的。因为其它方向点阵参数的不同将使基体周围产生弹性应变，通常称为共格应变(coherency strain)，如图4-19。粗黑线内为析出物，两相在垂直方向为共格

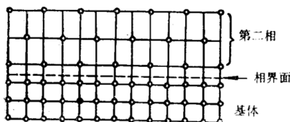
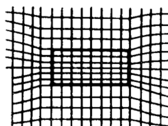


图4-18　共格相界面


图4-19　随着析出相的析出存在共格应变

界面，而在水平方向就存在共格应变。

(二)半共格相界面

两相晶体结构相同，但二者点阵参数有小于10％的误差，或夹角有少量差异，这样的相界面称为半共格相界面(Semi-coherent onterfaces)。这种相界面难于保持共格，可引入一系列位错来补偿两相点阵参数的差异(图4-20)。设上半部的点阵参数小，下半部的点阵参数大，二者的原子间距分别为a_1，a_2。因为$a_1 \neq a_2$所以晶界不能完全匹配。当a_1-a_2较小时，晶界可以对齐，但要产生弹性共格应变，所以晶界的大小是有限的。这些弹性应变可导致晶体上半部形成多出半原子面。因此，半共格相界是由位错和共格相界所组成。$(a_2-a_1)/a_1$值的大小称为错配度，用它可以表示不相匹配的程度。它可以用位错多少来调节。

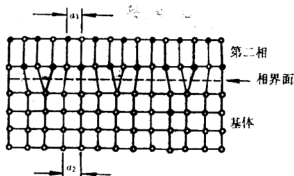


图4-20 半共格相界面

半共格相界的应力场，应变能，运动和其他性质取决于位错在相界中存在的形式，因为界面位错的柏氏矢量可能与界面成一角度。但实际上只有刃型位错分量才能有效地调节错配。不过相界面上的位错确实有明显的刃型位错特征，在实际多相合金的相界上观察不到以螺型位错为主的位错。

(三)非共格相界面

当错配太大时以界面为边界的两相原子排列完全不对应，已失去了共格的特征，且位错间距近似等于点阵参数。因此非共格相界面类似于大角度晶界(见图4-21)。

(四)相界能

相界能除了弹性能以外，显然还应有化学相互作用的部分。如果相界能主要是前者，就可作如下近似：仿照晶界能的计算方法，设单位长度内有$1/D$根位错线，如忽略远程弹性应力场的常数部分，则单位面积的相界能可写成：

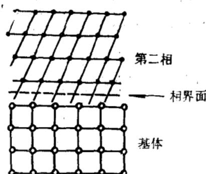


图4-21　非共格相界面

$$E_p=\frac{1}{D}\,\frac{\bar{G}b^2}{4\pi k}\ln\frac{D}{r_0} \tag{4-14}$$

式中，$\bar{G}$为平均切变模量，$1-\bar{\nu}\leqslant k\leqslant 1$，$\bar{\nu}$为平均泊桑系数，$r_0\simeq b$，或可改写成

$$E_p=E_{p0}\delta(A_p-\ln\delta) \tag{4-15}$$

式中，$E_{p0}=\dfrac{\bar{G}_b}{4\pi k\sin\theta}$，$A_p=\ln\sin\theta$，$\delta$为点阵平移的相对差值，

$\delta=\dfrac{b}{D}\sin\theta$，$\theta$为斜方晶格的晶棱夹角。

从形式上来看(4-15)式也很类似晶界能公式，随着δ的增加，E_p开始增加很快，当$\delta=e^{-1}$时达到最大值；若δ再增加，由于位错密度太大式(4-14)就不适用了，以后相界能便可能保持为一常数。

相界与晶界不仅在能量公式上有上述类似之处，而且实验还证明，相界的移动也是通过相界上的台阶，滑移面的运动来完成的。

二、反相畴界

当溶质、溶剂含量达到（或接近）一定比值时，某些置换固溶体和中间相可在低于一定温度转变为长程有序排列的超结构。

这种从无序到有序的转变一般也是形核和长大的过程。当这些长大着的有序区域相遇时，其交界处构成反相畴界(antiphasa baundary)，如图4-22中的$PQRST$。可以看出，A原子与B原子所占据的点阵在两个有序区域中恰好相反，结果在相同原子处形成了反相畴界。目前反相畴界的结构已经可以用透射电子显微镜和场离子显微镜揭示出来。

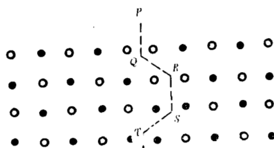


图4-22 反相畴界

◦—A原子；•—B 原子

反相畴界的形成可以有以下两种方式：

(一)有序化时形成

在讨论有序化时要引入亚点阵的概念。当一定数量的某类原子占据一种亚点阵时合金就有序化了。两种亚点阵是完全等效的。α 亚点阵与 β 亚点阵互换不会影响问题的实质。发生有序化时，在某一区域的A原子进入了α亚点阵，而在另一区域的B原子进入了α亚点阵，这样形成了两个有序化的核心。当这两个核心相遇时，它们之间是反相的，也就是A原子与B原子占据的亚点阵在两个有序区域中恰好相反。有序化的过程是先形成小的有序畴，亦称有序核心，而后依靠畴界的移动长大到彼此相遇，然后再通过畴的集聚或粗化，有些畴缩小、消失，有些畴继续长大。

(二)由位错运动形成

在长程有序固溶体中，单个位错运动时将使异类原子的有序排列遭到破坏，晶体点阵中滑移面上，下原子对的组合会发生变化，出现同类原子相邻排列的反相畴界(见图4-23)。

在有序合金中，任何一新原子均优先选择异类原子作为它的

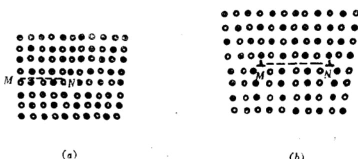


图4-23 由位错运动形成的反相畴界
（a）一个位错运动；（b） 一对位错运动形成的反相畴界

近邻，这样能量较低。当一个位错在有序合金中运动时（图4-23(a)），反相畴界增加，能量增加，故需要较大的外力。因此在长程有序合金中，位错往往是成对存在的（图4-23(b)）。在每一对位错中间夹着一层错排原子——反相畴界 MN。沿滑移面运动的位错对的率先位错使得有序遭到破坏，位错对的后一位错又将有序恢复。另一位错对的率先位错又使它再次破坏，如此等等。

反相畴界是内界面的一种，畴界亦具有畴界能，其数值与畴界的位向和有序固溶体的结构类型有关。

§5 晶界能

晶界上由于原子排列是畸变的，因而自由能要增高，这额外的自由能称为晶界能。

一、晶界能的计算

小角度晶界的位错模型能否成立，不仅决定于两晶粒之间的位向关系，还要看这组位错之间沿滑移面有无切应力作用及应变能的大小。显然，只有位错彼此之间无切应力作用，其周围又无长程应力，即应变能较低的位错组态，才是稳定的晶界位错模型。

李振民曾计算了无限长刃型位错列的应力场。假设若干个柏氏矢量为 b 的刃型位错墙组成了$x=0$的对称倾斜晶界，位错线平行于 Z 轴，其中的一个位错位于 Z 轴，而该位错的上、下各有N个位错，则晶界应力场为

$$\sigma_{xx}=\frac{-Gb}{2\pi(1-v)}\sum_{n=-N}^{N}\frac{y_n(3x^2+y_n^2)}{(x^2+y_n^2)^2} \tag{4-16}$$

$$\sigma_{yy}=\frac{Gb}{2\pi(1-v)}\sum_{n=-N}^{N}\frac{y_n(x^2+y_n^2)}{(x^2+y_n^2)^2} \tag{4-17}$$

$$\sigma_{zz}=\frac{Gb}{2\pi(1-v)}\sum_{n=-N}^{N}\frac{x(x^2-\hbar_n^2)}{(x^2+y_n^2)^2} \tag{4-18}$$

式中，$y_n=y-nD$，D 是位错间距。各位错相加的作用在距离原点 nD 范围内是互相抵消的。例如$n=0$的位错在 $y=\dfrac{D}{2}$处的 σ_{xx}，

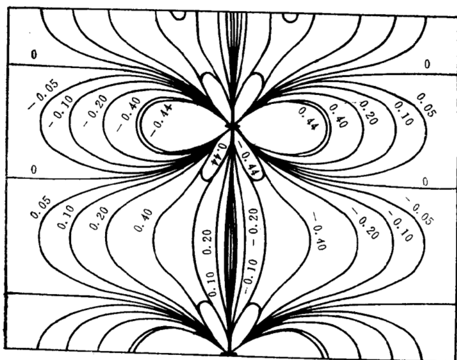


图4-24　无限长刃型位错列的σ_{xy}应力场应力单位$Gb/2(1-v)D$

σ_{yy}和σ_{zz}的应力被 $n=1$ 位错的那些应力所抵消。$n=-1$，$n=2$位错的相加，以及$n=-2$，$n=3$ 等位错的相加使应力相消区域扩大。式(4-16)~(4-18)的确切求和是对无限长位错列组成的墙，即$N\to\infty$。σ_{xy}的解表示于图4-24。当$|x|\geqslant D/2\pi$，σ_{xy}近似为

$$\sigma_{xy}\cong\frac{2\pi Gbx}{(1-\nu)D^2}\cos\left(\frac{2\pi y}{D}\right)\exp\left(\frac{-2\pi|x|}{D}\right)$$

因而，远离晶界处，σ_{xy}随x成指数减小。在刃型位错墙附近($|x|\leqslant D/2\pi$)，应力受最近三个位错中一个所控制。由于晶界周围的应力是局部的，应变较小，因而这种晶界是稳定结构。

对于由四个刃型位错排成一列的应力场，如图4-25所示。该

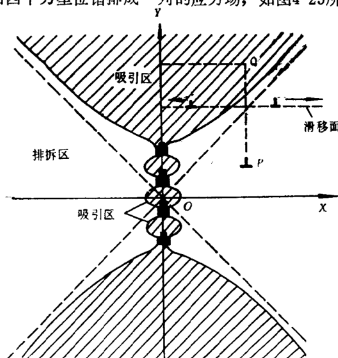


图4-25　四个刃型位错排成一列的位错墙，阴影线与无阴影线的边界是零切应力线

图表示一个刃型位错与同号刃型位错墙的交互作用。靠近位错墙位错受短程应力。在吸引区这个位错可使位错墙上的近邻位错移

动一个较小的距离，因而形成两个位错共有一个位错墙的位置。换句话说，假如有足够的温度，位错墙上的位错可以沿 PQ 攀移。位错墙存在容纳该多余位错的位置。图4-25表示出相互吸引和排斥的区域。可以看出，与位错墙相距 $\geq D$ 处，在画阴影线的区域内发生相互吸引。近似地可以 $y=\pm x$ 线（虚线）表示。在这些区域内，位错墙上位错的应力场是彼此增强而不是抵消，相当于在原点有一个柏氏矢量为 $4b$ 的大位错。

了解位错列的应力场之后，可以计算其应变能。倾斜晶界的界面能基本上由位错列的应变能所构成。

已知单位长度刃型位错的能量为

$$\frac{Gb}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{R}{r_0}+E_c$$

式中，R 是位错产生的弹性畸变影响所及的距离，r_0 是位错核心区的半径，E_c 是位错核心的能量。根据刃型位错应力场的性质，从图4-25可见在与晶界距离大于位错间距 D 的区域，各位错所产生的应力场将相互抵消，即应取 $R=D$；另一方面，在垂直于位错线方向的单位长度中，位错数为 $\frac{1}{D}=\frac{\theta}{b}$，因此，如果取 $r_0=b$，则单位面积对称倾斜晶界的界面能为

$$E=\frac{Gb\theta}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{1}{\theta}+\frac{\theta}{b}E_c=E_0\theta(A-\ln\theta) \qquad (4\text{-}19)$$

式中 $\quad E_0=\frac{Gb}{4\pi(1-\nu)},\quad A=\frac{4\pi(1-\nu)E_c}{Gb^2}$

二、有关晶界能的分析

由式(4-19)可以看出晶界能包括两项：第一项为 $E_0\theta A$，这一项是各个位错中心能对总能量的贡献，与其它位错存在无关。因为这一项与 θ 成比例，就是与位错排列的密集程度成比例（包括

位错本身的畸变能）。第二项$(-E_0\theta\ln\theta)$表示晶界上各位错的交互弹性能。由式(4-19)和图4-26可知，当θ比较小时，晶界能随θ的增加而增加，这是由于位错数目的增多，相应的引起畸变区域$D=b/\theta$变狭，故晶界能就产生降低的所倾向。所以总的来说，当θ达到一定值θ'后，式(4-19)代表的曲线将出现一极大值。若θ再大，位错密度增加后，使得弹性应力场高次项的影响，位错中心的影响以及晶界两边晶内形变的影响等都逐渐变得不能忽略不计。因此式(4-19)仅适用小角度晶界。这是很明显的，因为：为了以θ代替$\sin\theta$已经假定θ值很小；另外当θ大时，D值减小，刃型位错能量的公式便失去意义。从式(4-19)还可看到，由θ趋近于零，单位面积晶界能也趋近于零，所以E与θ曲线通过原点。

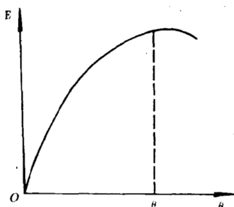


图4-26　晶界能和位向差θ间关系的计算结果

大量实验结果也证明晶界能随两侧晶粒位向差的增大，开始增长很快，然后逐渐减慢，θ再增大，晶界能基本保持不变。可是在某些能使晶粒配合良好的特殊位向，晶界能还会有所下降。按照重合位

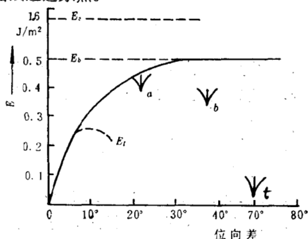


图4-27　铜的晶界能

置点阵模型，这些使晶界能下降的特殊位向关系即相当于出现高密度重合位置点阵的情况。图4-27是铜的晶界能随位向差的变化曲线。图中给出了小角度晶界能E_l，大角度晶界能E_b和表面能的极限值E_s。另外标出了两个有特殊位向差的重合位置点阵晶界能的位置a和b，t表示共格孪晶界的位置。各种金属的大角晶界能约在0.2～1.0J/m² 范围内。在表4-3中列出了一些金属大角度晶界能的实验值。晶界能对金属的显微组织特别是在合金中对相的形态及分布起着重要作用。

表4-3　大角度晶界能的实验值

金　　属	晶界能（J/m²）
Cu	0.60
Au	0.35
Ag	0.46
Pb	0.20
γ-Fe	0.78
Sn	0.10

参　考　文　献

1. 哈宽富，金属力学性能的微观理论，科学出版社，1983
2. 赖祖涵，金属的晶体缺陷与力学性质，冶金工业出版社，1988
3. Mclean D，金属中的晶粒间界，杨顺华译，科学出版社，1965
4. Johnson W.C, Interfacial Segregation, ASM, 1977
5. 徐祖耀、李明兴，材料科学导论，上海科学技术出版社，1986

6. Balluffi R. W, Grain-Boundary Structure and Kinetics, Am.Soc. Metals, 1979
7. Kinsman K.R 等, Interfacial structure in Crystals《Metallography》, 4(1974)361～396
8. Brandon D.G等, Acta Met, 12(1964)813
9. Li J.C.M（李振民）, Surface Sci, 31(1972)12,
10. 刘文西等，材料结构电子显微分析，天津大学出版社，1989

习题及思考题

1-1 说明反相畴界中"反相"的含义。

1-2 直接观察铝试样发现，晶粒内部的位错密度为$5\times10^{13}m^{-2}$，如晶粒间的位向差为5°，试估算界面上的位错间距和晶粒的平均尺寸。

1-3 两个小角度倾斜晶界如果合并成一个晶界，其能量是增大还是降低？为什么？

1-4 反相畴界的能量为$10^{-6}J/cm^2$，试估计一超位错中两刃型位错之间的距离。

第五章　缺陷间相互作用

上面几章讨论了点、线和面三类缺陷的基本性质。晶体中缺陷的存在破坏周围原子和电子的平衡分布，引起附加场。所以缺陷间会有相互作用。作用的实质就是缺陷附加场间的相互影响。就作用的性质来说可以分为静电间、弹性间和化学的互作用。本章首先讨论位错与点缺陷之间相互作用，因为由此可以了解这些互作用是怎样产生的，它们之间的相对重要性。还可以了解在许多问题上尤其是力学问题上讨论时为什么主要考虑缺陷间弹性互作用。

§1　溶质原子与位错相互作用

一、静电互作用

晶体中有一刃型位错，其周围原子偏离平衡位置，晶格体积发生弹性畸变$\Delta=\dfrac{\Delta V}{V}$。$V$为晶格体积。由金属自由电子理论得知，自由电子的弗米能E_F：

$$E_F=E_o+E_{max}$$

式中，E_o为自由电子势能，即能带底部能级的能量。E_{max}为自由电子的弗米动能。晶格畸变导致弗米能改变δE_F：

$$\delta E_F=\left(\frac{\partial E_0}{\partial\Delta}\right)\Delta+\frac{\partial E_{max}}{\partial\Delta} \qquad (5\text{-}1)$$

晶格平衡原子间距决定于平均能量E的极小值，即

$$\left(\frac{\partial \overline{E}}{\partial \Delta}\right)_{\Delta=0}=\frac{\partial}{\partial \Delta}\left(E_0+\frac{3}{5}E_{max}\right)_{\Delta=0}=0$$

所以，

$$\frac{\partial}{\partial \Delta}E_0=-\frac{3}{5}\frac{\partial E_{max}}{\partial \Delta}$$

代入(5-1)式，求得

$$\delta E_F=\frac{2}{5}\left(\frac{\partial E_{max}}{\partial \Delta}\right)_{\Delta=0}\Delta \tag{5-2}$$

从金属自由电子论得知：

$$E_{max}=\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{CV}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{5-3}$$

式中，C为常数，N为自由电子数。因此：

$$\delta E_F=\frac{2}{5}\left(-\frac{2}{3}E_{max}\right)=-\frac{4}{15}E_{max}\Delta \tag{5-4}$$

从(5-4)式说明$\Delta>0$的地方，弗米能降低，$\Delta<0$ 的地方则相反。由于刃型位错的滑移面上面和下面的畸变是相反的，上面受压$\Delta<0$ 而下面受拉 $\Delta>0$，导致滑移面上、下部分弗米能不相等。为了抵消这种不平衡，位错周围的电子要重新分布，形成了电偶极。刃型位错线如同一条电偶极线，因此在它的周围存在着附加电场，可以与溶质原子等发生静电相互作用。因为溶质原子（包括空位）的原子价一般不同于基体原子的原子价，在溶质原子周围存在屏蔽的库伦场。位错与溶质原子的静电作用实质上就是位错电偶极场与溶质原子的屏蔽库伦场的相互作用。

对螺位错来说，因△等于零似乎没有静电作用。但需知螺位错的△等于零是线性弹性理论处理得出的结果。若考虑非线性弹性效应，螺位错中心也将带有电荷，它与溶质原子之间也有静电互作用。

今以铜合金为例估计静电互作用的大小。设铜中溶入原子价为 z 的溶质原子。根据Mott[2]的刚能带模式可以算出屏蔽位E_g:

$$E_g = -\frac{ze^2}{r}\exp(-\alpha r)$$

式中，α为屏蔽常数，若将有关值代入就可以求出E_g值。在铜基合金中原子价为 z 的溶质原子产生的屏蔽位可以用有效电荷 $q = 0.075(z-1)e$产生的库伦电位等效。因此位错与溶质原子的静电互作用按(5-4)式可以写成：

$$\delta E_F = -\frac{4}{15}E_{max}\Delta[0.075(z-1)]$$

已知铜的$E_{max}\simeq 7eV$，这样：

$$\delta E_F = 0.14(z-1)\Delta(ev) \qquad (5\text{-}5)$$

二、化学互作用

在层错能较小的金属中位错以扩展位错形式存在。为了保持热平衡，溶质原子在层错区的浓度与基体的不同，它阻碍扩展位错运动，这种扩展位错与溶质原子互作用，Suzuki 称为化学互作用。将层错区和基体看作两个相就可以估计化学互作用的大小。

设C_1和C_2分别表示层错区和基体的溶质浓度，由于层错区所占的体积分数很小，故溶质原子在基体的浓度C_2可近似地等于平均浓度C_0。热平衡条件近似的可写成：

$$\left(\frac{\partial f^m}{\partial c}\right)_{C_0} = \left(\frac{\partial f^s}{\partial c}\right)_{C_I} \qquad (5\text{-}6)$$

式中，f^m和f^s分别为基体和层错区的克分子自由能。二元合金的基体克分子自由能为[4]：

$$f^m = (1-C)f_A + Cf_B + RT[C\ln C + (1-C)\ln(1-C)] - C(1-C)W_0$$

$$W_0=\frac{Nz}{2}[2V_{AB}-(V_{AA}+V_{BB})].$$

式中，f_A和f_B为纯基体原子A和溶质原子B的克分子自由能，V_{AB}、V_{AA}和V_{BB}为$A-B$，$A-A$和$B-B$原子间互作用位能，z为配位数。假定二元合金为理想固溶体，则$W_0=0$，所以：

$$f^m=(1-c)f_A+cf_B+RT[c\ln c+(1-c)\ln(1-c)]$$

层错区克分子自由能为：

$$f^s=(1-C)f_A+Cf_B+RT[C\ln C+(1-C)\ln(1-C)]$$

$$+\frac{V}{h}\gamma$$

式中，h为层错厚度，V为克分子体积，故$\frac{V}{h}$代表克分子层错区宽度。将f^m和f^s代入(5-6)式，并设$\gamma=\gamma_A+C(\gamma_B-\gamma_A)$，则导出：

$$\frac{V(\gamma_B-\gamma_A)}{hRT}=\ln\frac{C_0(1-C_1)}{C_1(1-C_0)} \tag{5-7}$$

由(5-7)式求出：

$$C_1=C_0/[C_0+(1-C_0)e^{Q/RT}]$$

$$Q=V(\gamma_B-\gamma_A)/h$$

若$\gamma_B<\gamma_A$，则$C_1>C_0$，层错区富集溶质原子。

如果扩展位错(见图5-1)滑移时，溶质原子B来不及扩散到新形成的层错区中去，即滑移前的层错区(x_1x_2)

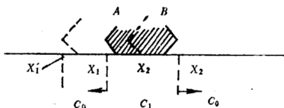


图5-1　扩展位错AB运动示意图

的浓度为C_1而滑移后的层错区的浓度为C_0，则单位长度位错在滑移进程中要克服层错区浓度改变带来的阻力。阻力τ_0为：

$$\tau_0 b(x_1' - x_1) = [\gamma(C_0) - \gamma(C_1)](x_1' - x_1)$$

即 $$\tau_0 b = (C_0 - C_1)(\gamma_B - \gamma_A) \tag{5-8}$$

三、弹性互作用

按照溶质原子松弛位错正应力或切应力可把弹性互作用分为Cottrell和 Snoek 型两类。由此引起的在位错附近溶质原子的偏聚称为Cottrell和Snoek气团。

1．Cottrell 弹性互作用。设位错AB位于坐标$oxyz$系的原点，z为位错线方向，在(xy)处有一溶质原子D，其原子半径为R_1。R为基体的原子半径。在溶质原子固溶处原子半径改变成$R(1+\epsilon)$。换句话说，溶质原子溶入基体后发生球形畸变，畸变量为ϵR（见图5-2）。Cottrell 弹性互作用的实质就是位错应力场对球形畸变所作的功。设(σ_{ij})为位错AB在(xy)点的应力张量，应力场理论得出作用在D点畸变球单位面积上法线方向的力T_N为：

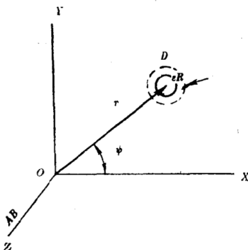


图5-2 Cottrell弹性互作用

$$T_N = (\vec{N} \cdot \sigma) \cdot \vec{N}_0$$

式中，N_0为法向单位向量。所以位错与点缺陷的互作用能$U(xy)$为：

$$U_c(xy)=\int T_N \epsilon R(R^2\sin\theta d\theta d\varphi)$$

$$=-\frac{4}{3}\pi\epsilon R^3(\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33}) \qquad (5\text{-}9)$$

假定AB为螺位错，则由于$\sigma_{11}=\sigma_{22}=\sigma_{33}=0$，所以$U(xy)=0$，但对刃型位错来说，由于

$$\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33}=-\frac{1+v}{1-v}\frac{Gb}{\pi}\frac{y}{x^2+y^2}$$

得出$U(x\cdot y)$为：

$$U_c(xy)=\frac{4}{3}\frac{1+v}{1-v}Gb\epsilon R^3\frac{y}{x^2+y^2}$$

$$=A\frac{\sin\phi}{r}. \qquad (5\text{-}10)$$

2. Snoek 弹性互作用[6]。有的点缺陷例如钢中碳间隙原子引起的畸变不是球对称的，它与位错的切应力有相互作用，被称为Snoek 弹性互作用。今以α-Fe中碳间隙原子为例讨论该类问题。在没有外力作用时，碳原子进入体心立方晶格的$(\frac{1}{2}\ 0\ 0)$、$(0\ \frac{1}{2}\ 0)$和$(0\ 0\ \frac{1}{2})$三种八面体间隙的机会是均等的。有外力作用时，三种间隙位置因碳原子的溶入而产生的畸变各不相同，从而形成碳原子分布的不均匀，构成了 Snoek 气团。

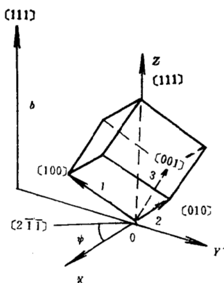


图5-3 Snoek弹性互作用

设碳原子间隙于$(\frac{1}{2}\ 0\ 0)$位置（见图5-3）。以[100]、[001]

和[001]方向为坐标轴(0,1,2,3系)，则碳原子间隙后引起晶胞形变张量S_c为：

$$S_C=(\epsilon_{ij})=\begin{vmatrix}\epsilon_1 & 0 & 0\\ 0 & \epsilon_2 & 0\\ 0 & 0 & \epsilon_3\end{vmatrix}$$

从碳原子引起马氏体晶格畸变规律得知 $\epsilon=0.38$，$\epsilon_2=\epsilon_3=-0.026$。设离碳原子距离为$r$的地方有一条螺位错，若以图示的$x'y'z'$为坐标轴，则[111]螺位错的应力张量$\sigma$为：

$$\sigma=(\sigma_{ij})=\frac{Gb}{2\pi r}\begin{vmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{vmatrix}$$

此处z'与[111]平行，y'与r平行，x'则与(111)面上的$(2\bar{1}\bar{1})$方向的夹角为ϕ。

推求碳间隙原子与螺位错互作用时，必须作坐标变换，可用εuler变换张量[5]把在(0123)坐标中的应变张量S_c变换到$(ox'y'z')$坐标系表示。变换后的应变张量元：

$$\epsilon_{x'z'}=\epsilon_{z'x'}=\frac{\sqrt{2}}{3}(\epsilon_1-\epsilon_2)\cos\phi$$

碳原子与[111]螺位错的互作用能U_s为：

$$U_S=-\frac{\mu b}{2\pi r}\begin{vmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\epsilon_{x'x'} & \epsilon_{x'y'} & \epsilon_{x'z'} & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{vmatrix}a^3$$

$$=-\frac{\mu b a^3}{2\pi r}(\epsilon_{x'z'}+\epsilon_{z'x})=A'\cos\phi/r \qquad (5\text{-}11)$$

式中，$A'=\frac{\sqrt{2}}{3\pi}bGa^3(\epsilon_1-\epsilon_2)$，$a$为晶格参数。

假定碳原子引起的畸变是球对称的，则因$\epsilon_1=\epsilon_2$而使 $U_s=0$，表明没有Snoek弹性互作用。用类同方法可以讨论间隙原子与刃位错的Snoək弹性互作用。

(5-11)式只表示间隙于($\frac{1}{2}$ 0 0)位置的碳原子与[111]螺位错的弹性互作用。间隙于(0 $\frac{1}{2}$ 0)和(0 0 $\frac{1}{2}$)位置的碳原子与位错的互作用能与(5-11)式相同，只要把ϕ改为$\phi\pm120°$。所以碳间隙原子与[111]螺位错互作用能的一般表达式：

$$U_s^i=\frac{A'}{r}\cos[\phi-(i-1)\frac{2\pi}{3}]\quad(i=1.2.3)$$

碳原子在($\frac{1}{2}$ 0 0)、(0 $\frac{1}{2}$ 0)和(0 0 $\frac{1}{2}$)三类间隙位置应保持动态有序分布。在 i 位置的碳原子的平均浓度C_i为：

$$C_i=[C_0e^{-U_S^i/kT}/[\sum_{i=1}^{3}e^{-U_S^i/kT}]$$

所以碳原子与[111]螺位错的弹性互作用能$\bar{U}_s$为：

$$\bar{U}_S=\int_0^{2\pi}\int_{r0}^{L}C_iU_S^i r\,dr\,d\phi$$

式中，L为位错胞的线度，在$R\gg\frac{A'}{kT}$时可以求得[7]：

$$\bar{U}_S=2\pi\frac{P}{a^3}\frac{A'^2}{kT}\left[1.1+\log\frac{LkT}{A'}\right]$$

$$=k\frac{P}{a^3}\frac{A'^2}{kT}\qquad(5\text{-}12)$$

式中，　$P=\frac{1}{2}C_0a^3$，$K=2\pi\left[1.1+\log\frac{LkT}{A'}\right]\cong41.$

四、三种互作用大小的比较

上面讨论得出铜合金中溶质原子与位错间静电互作能 δE_F、弹性互作用能δE_e和化学互作用能δE_C分别为：

$$\delta E_F = 0.14(z-1)\Delta(eV)$$

$$\delta E_e = U^c = \frac{4}{3}\mu b \frac{1+v}{1-v} \epsilon R^3/r$$

$$\delta E_C \simeq z_0 b^3 = (C_0 - C_1)(\gamma_B - \gamma_A) b^2$$

$$C_1 = C_0/[C_0 + C_1 - C_0) e^{Q/kT}]$$

由于γ_B、γ_A…等参量缺乏准确数据，所以估计是近似的粗糙的。下面以 Cu-Zn 合金为例作粗略比较。设 $C_0 - C_1 \simeq 1\%$，$\gamma_B - \gamma_A \simeq 200\times10^{-7}\text{Jcm}^{-2}$，$b \simeq 2.55\times10^{-8}\text{cm}$，$v \simeq \frac{1}{3}$，$G \simeq 4\times10^5\text{Ncm}^{-2}$ $r \simeq \frac{b}{2}$。

得出：

$$\delta E_F = 0.14\Delta(\text{eV})$$

$$\delta E_e = 16\mu b^3 \Delta \simeq 1\Delta(\text{eV})$$

$$\delta E_C \simeq 0.1(C_0 - C_1)(\text{eV})$$

因为Δ与$(C_0 - C_1)$同样量级（$\sim 1\%$），δE_e要比δE_F和δE_C大得多。因此在讨论缺陷之间相互作用时，往往强调弹性互作用。

§2 平行位错之间相互作用

图5-4的两条位错线AA' 和 BB'相互平行且平行于 z 轴。它们的柏氏矢量分别为$b_A = b_A^x i + b_A^y j + b_A^z k$和$b_B = b_B^x i + b_B^y j + b_B^z k$。计算平行位错间相互作用的较简单方法就是将一个位错的应力场看

看作作用于另一位错上的外场，再根据Petch-Koehlar式计算。位错 AA' 的应力张量σ_A为：

$$\sigma_A=\begin{pmatrix}\sigma_{11}^A & \sigma_{12}^A & \sigma_{13}^A\\ \sigma_{12}^A & \sigma_{22}^A & \sigma_{23}^A\\ \sigma_{13}^A & \sigma_{23}^A & \sigma_{33}^A\end{pmatrix}$$

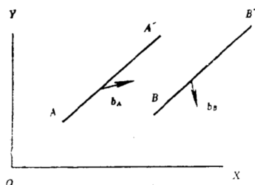


图5-4　平行位错间互作用

dl 段长度的BB'位错受到的力dF为：

$$\overrightarrow{dF}=(b_B\cdot\sigma_A)\times\overrightarrow{dl}$$

$$=(b_B^x,b_B^y,b_B^z)\begin{pmatrix}\sigma_{11}^A & \sigma_{12}^A & \sigma_{13}^A\\ \sigma_{12}^A & \sigma_{22}^A & \sigma_{23}^A\\ \sigma_{13}^A & \sigma_{23}^A & \sigma_{33}^A\end{pmatrix}\times k|dl|$$

$$\therefore\quad \frac{\overrightarrow{dF}}{|dl|}=(b_B^x\sigma_{11}^A+b_B^y\sigma_{12}^A+b_B^z\sigma_{13}^A)(-j)$$

$$+(b_B^x\sigma_{12}^A+b_B^y\sigma_{22}^A+b_B^z\sigma_{22}^A(i)\qquad(5\text{-}13)$$

从(5-13)式可以求出平行的螺位错间、刃位错间以及螺和刃位错间的互作用。

一、平行螺位错间互作用

这时$\vec{b}_A=b_A^z\vec{k}$，$\vec{b}_B=b_B^z\vec{k}$而

$$\sigma_A=\begin{pmatrix}0 & 0 & \sigma_{13}^A\\ 0 & 0 & \sigma_{23}^A\\ \sigma_{13}^A & \sigma_{23}^A & 0\end{pmatrix}$$

代入(5-13)式，求出：

$$\frac{d\vec{F}}{|dl|}=b_B^z(\sigma_{23}^A i-\sigma_{13}^A j)=\frac{Gb_B^z b_A^z}{2\pi r}\vec{r}_0 \qquad (5\text{-}14)$$

二、平行刃位错间互作用

这时$\vec{b}_A=b_A^x\vec{i}$，$\vec{b}_B=b_B^x\vec{i}$而

$$\sigma_A=\begin{pmatrix}\sigma_{11}^A & \sigma_{12}^A & 0\\ \sigma_{12}^A & \sigma_{22}^A & 0\\ 0 & 0 & \sigma_{33}^A\end{pmatrix}$$

代入(5-13)式，求出：

$$\frac{d\vec{F}}{|dl|}=b_B^x\sigma_{11}^A(-\vec{j})+b_B^x\sigma_{12}^A(\vec{i})$$

$$=\frac{Gb_B^x b_A^x}{2\pi(1-v)}\left[\frac{x(x^2-y^2)}{r^4}\vec{i}-\frac{y(3x^2+y^2)}{r^4}\vec{j}\right] \qquad (5\text{-}15)$$

三、螺和刃位错间互作用

这时$\vec{b}_A=b_A^z\vec{k}$，$\vec{b}_B=b_B^x\vec{i}$而

$$\sigma_A=\begin{pmatrix}0 & 0 & \sigma_{13}^A\\ 0 & 0 & \sigma_{23}^A\\ \sigma_{13}^A & \sigma_{23}^A & 0\end{pmatrix}$$

代入(5-13)式求出：

$$\frac{d\vec{F}}{|dl|}=(b_B^x\cdot 0)(-j)+(b_B^x\cdot 0(i)=0 \qquad (5\text{-}16)$$

§3 位错塞积群应力场的计算

形变时，同一滑移面内从位错源产生出来的一组位错受阻于

晶界或第二相等某种障碍物前面，形成同号（例如正刃型）位错的塞积。图5-5为形变不诱钢中塞积在晶界前位错群的电镜照片。图5-6为位错塞积群示意图。设想这些位错沿x轴塞积起来。在外

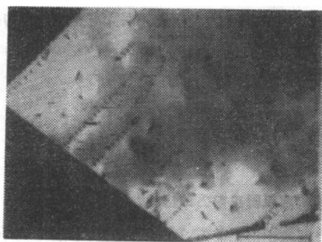


图5-5 位错在晶界前堆积(Cu-4.5%Al合金)

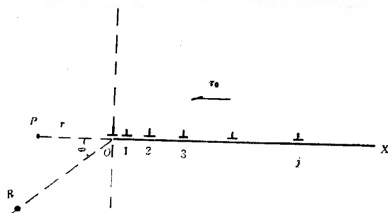


图5-6 位错塞积群

应力τ_0作用下，各个位错的平衡位置依次标以 1 2 3 … n。令第一个位错在$x=0$的地方。第 j 个位错所受的力为：

$$f_j=\frac{Gb^2}{2\pi(1-D)}\sum_{i\neq j}^{n}\frac{1}{x_j-x_i}-b\tau_0 \qquad (5\text{-}16)$$

平衡时$f_i=0$，遂可求得$n-1$个联立方程：

$$\frac{\tau_0}{D}=\sum_{i\neq j}^{n}\frac{1}{x_j-x_i} \qquad D=\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$$

当n很大时，Eshelby[8]等人求得上述联立方程近似解为：

$$x_i=\frac{D\pi^2}{8n\tau_0}(i-1)^2 \tag{5-17}$$

设L为塞积群总长，则

$$L=\frac{D\pi^2}{8n\tau_0}n^2 \quad 即 n=\frac{8}{\pi^2}\frac{L\tau_0}{D} \tag{5-18}$$

一、计算塞积群正前方的应力

现由计算塞积群正前方γ远处一点P(图5.6)的切应力$\tau(\gamma)$：

$$\tau(r)=\tau_0+\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{r+x_i} \tag{5-19}$$

这要分三种情况讨论。

1．当$\gamma\ll x_2$时，只需考虑领先位错的作用，其他位错作用可以忽略，这样

$$\tau=n\tau_0 \tag{5-20}$$

2．当$r\gg L$时，则$r+x_i\simeq r$

$$\tau(r)=\tau_0+\frac{Gbn}{2\pi(1-\nu)r} \tag{5-21}$$

3．当$x_2<r<L$时，可以将塞积群的位错分布看作位错群的连续分布，这样(5-19)式可化为积分式进行计算。根据(5-17)式算出塞积连续分布群中单位长度的位错数$\frac{di}{dx}$：

$$\frac{di}{dx}=\frac{\tau_0}{D\pi}\left(\frac{L}{x}\right)^{\frac{1}{2}}$$

因而

$$\tau(r)=\tau_0+D\int_0^L\frac{1}{r+x}\left(\frac{di}{dx}\right)dx$$

$$=\tau_0+D\int_0^L\frac{\tau_0}{D\pi}\frac{1}{r+x}\left(\frac{L}{x}\right)^{\frac{1}{2}}dx$$

$$\cong\tau_0\left[1+\left(\frac{L}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \tag{5-22}$$

如塞积群由混合位错组成，则只要把有关公式[如(5-19)式……]中的$\frac{1}{1-\nu}$因子改为$\frac{1}{K}$，而$K=(\cos^2\varphi+\frac{\sin^2\varphi}{1-\nu})^{-1}$

二、计算塞积群前任一点$R(r\cdot\theta)$的应力

这首先要把塞积群中各个位错在R处的应力根据应力场表达式写出，而后将它们叠加起来。假定塞积群由正的刃型位错组成，则：

$$\sigma_{xx}^R=\sum_{i=9}^{n-1}Dr\sin\theta[r^2\sin^2\theta+3(r\cos\theta+x_i)^2]/[r^2\sin^2\theta+(x_i+r\cos\theta)^2]^2$$

$$\sigma_{yy}^R=\sum_{i=0}^{n-1}Dr\sin\theta[r^2\sin^2\theta-(r\cos\theta+x_i)^2]/[r^2\sin^2\theta+(x_i+r\cos\theta)^2]^2$$

$$\sigma_{xy}^R=\sum_{i=0}^{n-1}D(r\cos\theta+x_i)(r^2\sin^2\theta-(r\cos\theta+x_i)^2]/[r^2\sin^2\theta+(x_i+r\cos\theta)^2]^2$$

Stroh[9]对上述问题作出计算，得出：

$$\frac{1}{2}(\sigma_{xx}^R+\sigma_{yy}^R)/\tau_0\doteq\sin\theta/2r+2\left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}2\sin\frac{\theta}{2}$$

$$\frac{1}{2}(\sigma_{xx}^R - \sigma_{yy}^R)/\tau_0 = \sin\theta\cos^2\theta/r + \left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\left(2\cos\frac{\theta}{2}\right.$$

$$\left. + \sin\theta\cos\frac{3}{2}\theta\right)$$

$$\sigma_{xy}^R/\tau_0 = -\cos\theta\cos^2\theta/2r - \left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\left(2\cos\frac{\theta}{2}\right.$$

$$\left. - \sin\theta\sin\frac{3}{2}\theta\right)$$

当 $x_2 < r < L$，从(5-17)式得出$\frac{1}{n} < r < n$，所以$\frac{1}{r}$项比$\left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}$项小得多，在忽略$\frac{1}{r}$项后得出：

$$\frac{1}{2}(\sigma_{xx}^R - \sigma_{yy}^R)/\tau_0 = 2\left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\frac{1}{2}\theta$$

$$\frac{1}{2}(\sigma_{xx}^R - \sigma_{yy}^R)/\tau_0 = \left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\left(2\cos\frac{\theta}{2} - \sin\theta\cos\frac{3}{2}\theta\right)$$

$$\sigma_{xy}^R/\tau_0 = -\left(\frac{n}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\left(2\cos\frac{\theta}{2} - \sin\theta\sin\frac{3}{2}\theta\right)$$

根据(1-25)式可以求出作用于 OR 单位面积上(见图5-6)法向应力σ_N^R和切向应力τ^R分别为：

$$\sigma_N^R = (\sigma\cdot\vec{N}_0)\cdot\vec{N}_0$$

$$= \frac{1}{2}(\sigma_{xx}^R + \sigma_{yy}^R) - \frac{1}{2}(\sigma_{xx}^R - \sigma_{yy}^R)\cos 2\theta - \sigma_{xy}^R\sin 2\theta$$

$$= \frac{3}{2}\left(\frac{L}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\tau_0\sin\theta\cos\frac{\theta}{2} \tag{5-23}$$

$$\tau^R = (\sigma_{xx}^R + \sigma_{yy}^R)\sin\theta\cos\theta + \sigma_{xy}^R$$

$$= \left(\frac{L}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\tau_0\left[\sin\frac{\theta}{2}\sin 2\theta - \cos\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{3}{2}\theta\right] \tag{5-24}$$

§4 位错间近程互作用

前节讨论的是位错间远程互作用，即相隔一定距离的位错通过弹性场而相互作用，而且假定了位错组态不发生变化。但当位错相互运动到很近距离形成位错相交时就会改变位错组态，这种作用称为近程互作用。位错组态的改变过程称为位错反应。由于原来位错组态不同，位错相交后由于弹性互作用可以使位错间彼此吸引或彼此排斥而形成位错会合（形成新的位错或位错段）或者在原来的位错上形成割阶。

一、位错的汇合

两个相交的滑移面上有位错线AA和$A'A'$，它们的柏氏矢量为$\vec{b}_1$和$\vec{b}_2$，彼此间夹角大于$\frac{\pi}{2}$，所以相交前是彼此吸引的，若最后相交于O点（如图5-7）所示。显然四重节点O是不稳定的，

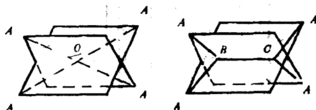


图5-7 位错的汇合

要分解形成两个三重结点B和C及一条新位错线BC。其柏氏矢量$\vec{b}=\vec{b}_1+\vec{b}_2$。$BC$位错的滑移面不同于原位错$AA$和$A'A'$的滑移面。当$AA$和$A'A'$位错相交后又继续运动时，新形成的$BC$位错会起阻碍作用。实际晶体中位错的汇合问题在下一节讨论。

二、位错的交割

两个位错相交时如果形成汇合位错的条件：$\vec{b}_1+\vec{b}_2=\vec{b}$，$b_1^2$

$+b_2^2>b^2$不被满足，则相交后每个位错上会形成割阶，位错将带着割阶继续运动。下面先讨论二个特例，由此得出割阶形成的一般规律。

1．刃型位错与螺型位错交割。图5-8中 AB 是纯刃型位错，CD是纯螺型位错。由于CD位错存在使垂直于 CD 线的诸晶面变成螺距为b_2的连续蜷面。位错 AB 和它的柏氏矢量b_1 都垂直于 CD。因此AB位错的滑移面是与CD线垂直的晶面。位错 AB在与位错CD交截前在近乎平面的滑移面上运动。但交截后，AB 位错上的A走向A'而B走向B'。A'和 B' 不在同一晶面上而是处于蜷面的上下层上，所以在$A'B'$位错上形成一个大小和方向等于$\vec{b}_2$的割阶P_1P_1'。因为位错AB是正刃型位错，它的滑移面 π_1 的上部原子列比下部的多一排。当位错 AB 从右边移到左边$A'B'$位置后，多出的一排原子列也移到了左边，将在 CD 位错上形成大小和方向为$\vec{b}_1$的割阶。这种割阶处于滑移面上，称为扭折，它可以消失。故CD位错上不形成割阶。

2．相互垂直的两个纯螺型位错交割。图 5-9 中的AB和CD都是纯螺型。和图5-8的差别只在位错AB也是纯螺型的。AB和 CD 位错交截后无疑在AB位错上会形成PP'割阶。因 AB 位错是螺型

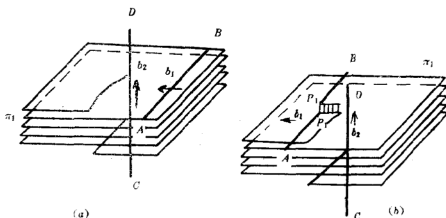


图5-8　刃型与螺型位错交截而产生一段刃型割阶p_1P'

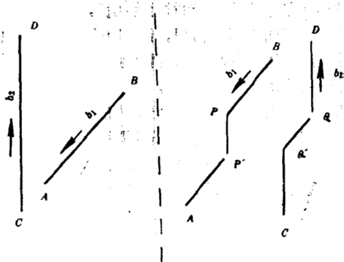


图5-9 相互垂直的螺位错的交截

的，与 AB 线垂直的晶面也成为间距为b_1的蜷面。当位错彼此交截以后在CD位错上也会形成大小和方向等于$\vec{b}_1$的割阶QQ'。

3．割阶形成的普遍规律。从上面讨论的两个特例可以得出割阶形成的一般规律。若有两个位错AB和CD，它们的柏氏矢量分别为$\vec{b}_1$和$\vec{b}_2$。这二个位错交截后每个位错上都会形成一个大小和方向对应另一位错柏氏矢量的割阶，即 AB 位错线上形成大小和方向等于$\vec{b}_2$的割阶而CD位错线上则形成大小和方向等于$\vec{b}_1$的割阶。

割阶实际上是一段原子大小尺度的位错段。它的形成增加体系的能量，在有条件的情况下割阶可以通过滑移消失。为此要讨论割阶的性质。设$\vec{\xi}_1$和$\vec{\xi}_2$是位错线AB和CD方向，$\vec{b}_1$ 和$\vec{b}_2$是他们的柏氏矢量。则位错AB和CD的滑移面的法线方向$\vec{n}_1$和$\vec{n}_2$分别由$\vec{\xi}_1\times\vec{b}_1$和 $\vec{\xi}_2\times\vec{b}_2$ 决定。交截以后在AB和CD位错上形成的割阶线段的方向分别为$\vec{b}_2$和$\vec{b}_1$，割阶线段的柏氏矢量仍是$\vec{b}_1$和$\vec{b}_2$，因此 AB和CD位错线上割阶的滑移面法线方向$\vec{n}_P$和$\vec{n}_Q$分别为$\vec{b}_2\times\vec{b}_1$和$\vec{b}_1\times\vec{b}_2$方向。假如割阶段在位错的滑移面内，则它可能通过滑移而消

失。这种出现在滑移面的割阶被称为扭折。

4．割阶对位错运动的阻碍。带割阶的位错由于割阶的滑移面、滑移速度与位错的滑移面、滑移速率不同，故滑移比较困难。就是说割阶将阻碍位错运动。

设AB位错是任何一个混合位错，柏氏矢量为$\vec{b}_1$，π_1是它的滑移面。P_1P_2是割阶，π_2是割阶的滑移面。π_1面和π_2面的交线P_1D与π_1面上向位错AB所作垂线TP_1的夹角为γ。当$\gamma=0$，位错AB是纯刃型的。如$\gamma=90°$，则位错AB是纯螺型的(图5-10)。很显然如果要求割阶与位错线作整体运动则要求：

$$v_2\cos\gamma=v_1$$

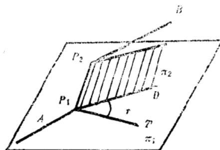


图5-10　割阶对位错运动的影响

式中，v_2为割阶滑移速率，v_1为位错运动速率。除$\gamma=0°$外，总要求$v_2>v_1$。因为位错运动速率与应力成正比，因此割阶运动总跟不上位错。即使$\gamma=0°$虽然要求割阶与位错同步运动只需$v_2=v_1$，但割阶的阻力还是存在，因为π_2面一般是高指数的面，它的晶格摩擦力较密排面π_1的大。因此不论何种情况，割阶总要阻碍位错运动。

当$\gamma=90°$，割阶P_1P_2是纯刃型的，当被迫随位错AB运动时，割阶实际上是在垂直于自身的滑移面π_2上运动，即攀移运动。割阶攀移运动将产生一系列空位或间隙原子，对位错运动产生很大阻力。上节谈到的螺位错与螺位错相交后在螺位错上形成的割阶属于这种类型。

§5　实际晶体中的位错反应

透射电镜观察积累了不少有关位错反应的资料，证实位错理

论的许多预测。下面以几个面心立方中的例子说明实际晶体中扩展位错间近程互作用问题。（下面的论述用 Thompson 符号）

一：Lomer-Cottrell位错的形成[10]

设(a)面上柏氏矢量为CD的位错与(d)面上柏氏矢量为AC的位错相对运动而相交，形成沿滑移面(a)和(d)交线的位错。它的柏氏矢量为AD，是按下列反应形成的。

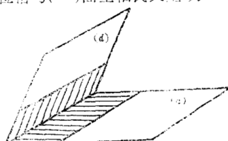
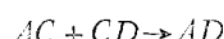


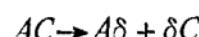
图5-11 面角位错的形成



$$AC + CD \rightarrow AD$$

AD为[110]方向，位错线段为[011]方向，故反应形成的位错的滑移面为(010)面，这种位错是不可动的。

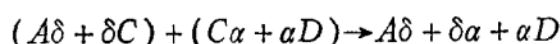
如果考虑到柏氏矢量为AC和CD的位错是扩展的，则通过以以下反应形成新的扩展位错。



$$AC \rightarrow A\delta + \delta C$$



$$CD \rightarrow C\alpha + \alpha D$$



$$(A\delta + \delta C) + (C\alpha + \alpha D) \rightarrow A\delta + \delta\alpha + \alpha D$$

这相当全位错AD分解为从(a)面延展到(d)面的扩展位错，层错像梯毡一样铺在两个面上，它的边界为不全位错$A\delta$和αD，棱为$\alpha\delta$不全位错(图5-11)。$(A\delta + \delta\alpha + \alpha D)$的扩展位错是不可动的，称为Cottrell-Lomer（又称面角）位错。

二、位错网络的形成

设想在(a)面上有一塞积位错群，柏氏矢量为DC，在(d)面上有一个柏氏矢量为CB的螺位错。位错与位错群交截反应形成

柏氏矢量为 DB 的新位错（见图5-12）。由于线张力作用，位错

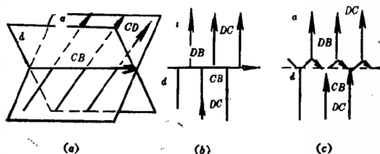


图5-12　位错网络的形成

组态变为图 5-12c 所示的形式以满足结点上线张力平衡的条件。这种反应可以解释实验观察到的六方位错网络的形成[11]（图5-13）细察图5-13还可以看到网络的有些节点是扩展的。这可用

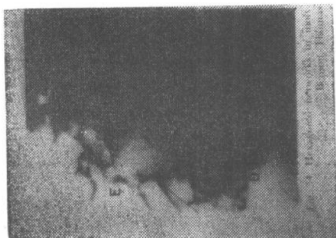


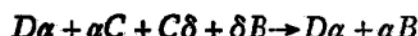
图5-13　不锈钢中位错网络

扩展位错的反应去说明：（a）面的柏氏矢量为DC和(d)面上柏氏矢量为 CB 的位错可分解为扩展位错：

$$DC \rightarrow D\alpha + \alpha C$$

$$CB \rightarrow C\delta + \delta B$$

扩展位错相交后通过反应：

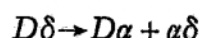


$$D\alpha+\alpha C+C\delta+\delta B\rightarrow D\alpha+\alpha B$$

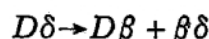
形成了$D\alpha+\alpha B$的扩展位错。

三、层错四面体的形成

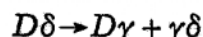
低层错能的金属淬火后有大量的正方形和三角形缺陷形成，内部出现层错干涉条纹（见图5-14）。Hirsch[12] 认为这是层错四面体在不同面上的投影。可以设想它是通过下述过程完成的。首先在(d)面上形成一片三角形层错。周界是(d)面与(a)、(b)、(c)面的交线[110]方向。层错边界的 Frank 位错按下式扩展：



$$D\delta\rightarrow D\alpha+\alpha\delta$$

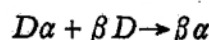


$$D\delta\rightarrow D\beta+\beta\delta$$

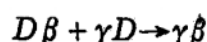


$$D\delta\rightarrow D\gamma+\gamma\delta$$

上述三个扩展位错分沿(a)、(b)、(c)面扩展开来，在相邻的棱上再反应形成：



$$D\alpha+\beta D\rightarrow\beta\alpha$$



$$D\beta+\gamma D\rightarrow\gamma\beta$$

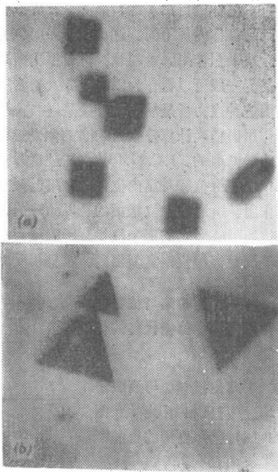
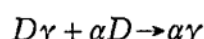


图5-14 淬火金样品中层错四面体
(a)(100)面投影；(b)(110)面投影



$$D\gamma + \alpha D \rightarrow \alpha\gamma$$

结果$\alpha\delta$，$\beta\delta$，$\gamma\delta$和$\beta\delta$，$\gamma\beta$，$\alpha\gamma$ 形成闭合的层错四面体。这种四面体在(100)面投影成正方形，(110) 面 上投影呈三角形。

§6 位错与面缺陷互作用

晶体的自由表面、晶界、相界或者层错等面缺陷内的原子排列与晶体内部不同。这构成了界面应力场，它对晶内的位错有排斥或吸引作用。第四章讨论曾得出面缺陷尤其小角晶界和准共格晶界一般可以看作为以一定方式组合成的位错组态。而且分析表明这种应力场是短程的，就是说当位错靠近面缺陷时才会感受到作用。精确计算替代面缺陷的位错组态与晶内位错的相互作用是比较困难的。J.C.M.Li[13] 作过这方面的研究。但分析后得出可以用镜像位错对晶内位错的作用近似替代面缺陷对位错的近距离作用。所谓镜像位错指的是以面缺陷为镜子将待研究的位错通过镜面反映形成的那个位错。所以位错和镜像位错构成面缺陷两边等同距离，位错类型相同、符号相反的一对位错。

一、面缺陷与位错作用可用镜像位错代替的依据

设位错 AB 与面缺陷 EF 平行且相距为 l（图5-15)。已知位错的自能W

$$W = \frac{Gb^2}{4\pi k}\ln\frac{l}{r_0}$$

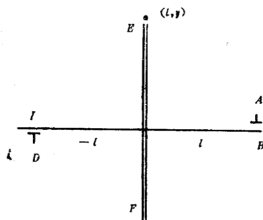


图5-15 位错与面缺陷互作用

面缺陷对位错作用力F可通过虚功原理求出，即假想位错向前移动δl的距离，算出所作的功就求出克服面缺陷阻力F：

$$F=\frac{\partial W}{\partial l}=-\frac{Gb^2}{4\pi k}\frac{1}{l}$$

图5-15中的ID为位错AB的镜像位错，它对AB位错的作用力F_I等于

$$F_I=-\frac{Gb^2}{2\pi k}\left(\frac{1}{2l}\right).$$

因为 $F_I=F$，所以可以用镜像位错去替代面缺陷的作用。

我们还可以从应力场的角度去讨论镜像位错替代面缺陷的依据。Koehler[15]曾证明过只要$l\gg b$，平衡的面缺陷 EF 上各应力张量元，至少是σ_{xx}要等于零。为要满足这样的应力状态需在界面的另一侧等距离的地方引入一个符号相反的位错。设位错是螺型的，则为了满足上述要求只要引入一个符号相反的螺位错即可。（若位错是刃型的，则情况较复杂，可参考资料[14]）。因为这样就能满足在面缺陷所在处各应力张量元均为零的要求。

$$\sigma_{xz}=-\frac{Gb}{2\pi}\frac{y}{l^2+y^2}+\left[-\frac{G(-b)}{2\pi}\frac{y}{l^2+y^2}\right]=0$$

$$\sigma_{xy}=\frac{Gb}{2\pi}\frac{l}{l^2+y^2}+\frac{G(-b)}{2\pi}\frac{l}{l^2+y^2}=0$$

二、界面对位错的作用

讨论界面对位错的作用要区分界面的类别。自由界面对位错的作用可以简单地用镜像位错等效。界面的作用力：

$$F=-\frac{Gb^2}{2\pi k}\frac{1}{2l}\tag{5-25}$$

表明自由界面对位错是吸引作用。

当自由表面被弹性常数为G'的介质面取代，例如两相界面、表面镀层、表面氧化层等情况下。为使界面EF上应力连续（图5-16），Head指出：除在界面左侧G'介面区域B处引入柏氏矢量为$[(G'-G)/(G'+G)]b$的镜像位错外，还需在界面右侧原位错所在的地方A处引入一个柏氏矢量为$[2G/(G'+G)]b$的附加位错，并假定该位错处在G'介质中。介质面对位错的作用可用镜像位错等效。因此作用力F为：

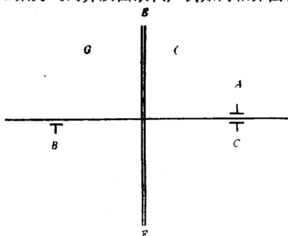


图5-16　介质面(弹性模量G')对位错的作用

$$F=\frac{G(G'-G)b^2}{2\pi k(G'+G)}\frac{1}{2l} \tag{5-26}$$

设$G'=0$则(5-26)式即为(5-25)式。设$G'>G$，则F为正值，表明介面排斥位错。若$G'>G$则F为负值，介质面吸引位错。表面活性介质质可使晶体软化的道理或许就在介质面帮助位错跑出表面。

如果介面很薄且最外层是自由表面$G=0$(见图5-17)。表面氧化层、钢件镀铬

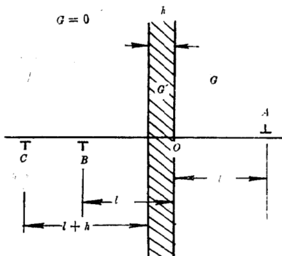


图5-17　介面层对位错的作用

层、渗碳层等就是这种情况。这时晶内位错受二层介质面作用。

$$F = F_1 + F_2 \tag{5-27}$$

其中F_1系G'介质面作用。

$$F_1 = \frac{G(G'-G)b^2}{4\pi k(G'+G)l}$$

而F_2系自由表面作用。

$$F_2 = -\frac{Gb^2}{2\pi k}\left[\frac{1}{2(l+h)}\right]$$

若$G'<G$则$F=F_1+F_2<0$，表面层软化金属。若$G'>G$要分几种情况讨论。(1) $l<h$，起主要作用的是F_1，故位错被G'介质面排斥。(2) $l>h$，起主要作用的是F_2，位错被吸向自由表面。(3) 当$h \simeq 2Gl/(G'-G)$时，$|F_1|=|F_2|$，则$F=0$，位错处于平衡状态。

参 考 文 献

1. H.Suzuki; "Dislocation and Mechanical Properties of Crystalo 1957.
2. R.A.Swalin; "Thermodynamics of Solids" 91.
3. A.H.Cottrell, B.A.Bilby; Proc. Roy. Soc. 1949. A52 49
4. F.Snoek, A.Seeger; Acta Met. 1959.7.469
5. A.W.Cochardt, G.Snoek, et al; Acta Met. 1955.3.533
6. J.D.Eshelby et al; Phil. Mag. 1960.42.745
7. A.N.Stroh .Proc. Roy. Soc. 1954.223A.404.
8. A.H.Cottrell. Phil. Mag. 1952. 43. 645.
9. M.J.Whelan; Proc. Roy Soc.1959 A 249 114

10. P.R.Hirsch, J.Silcox; "Dislocation in Metals" 262.
11. F.Thomas, at al edited; Electron Microscopy and Strength of Crystals. 713.
12. A.K.Head; Phil.Mag.1953.44.92.

习题与思考题

1. 面心立方金属中$\frac{a}{2}$[110]螺型位错分解成$\frac{a}{b}$[121]和$\frac{a}{b}$[21$\bar{1}$]二个不全位错，求这二个不全位错间的相互作用力大小和方向。

2. 图5-1中的二条无穷长直的位错A和B都是螺型位错。位

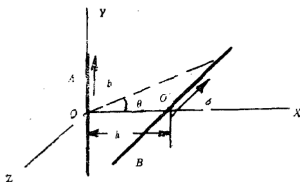


图5-1

错A与y轴平行，位错B与x轴平行，O及O'分别为A、B位错线与x轴的交点，$OO'=h$求证A位错对B位错的作用力

$$F=-\frac{Gb^2}{2\pi h}\cos^2\theta.$$

3. 估计单位原子长度的刃位错上形成饱和的Cottrell气团所需的碳原子数目。由此估算退火的碳钢中（设位错密度$\rho=$

$10^{10}/cm^3$ ）形成饱和的Cottrell气团所需的最低碳浓度。

4．图5-2中A是右旋螺型位错，处于平直的表面1和2的晶体内。镜像位错B能满足表面1无应力的要求，但在表面2形成残余应力，这需要镜像位错E来补偿，以此类推。类同情况适用于表面2的镜像位错C。于是表面1和2对位错A的作用要用镜像位错B、C、D……等系列等效。试证A位错所受到的力：

$$\sigma = -\frac{Gb}{4\pi d}\sum_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\left(n-\frac{l}{d}\right)} = \frac{Gb}{4\pi d}\sum_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(n+\frac{l}{d}\right)}$$

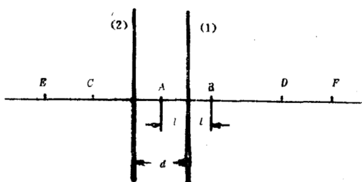


图5-2

第六章　位错理论在金属强度中应用

半个世纪以来，位错理论就是在论述金属力学行为中得到发展的。至今位错理论不但能定性地阐明金属力学性质的各种问题，而且有些问题已深入到定量处理。位错理论在金属强度中应用内容极其丰富，本章谈及的仅是应用方面的某些基本例子，在处理上偏重于定性或半定量。着重讨论三个方面的问题：(1)金属强度；(2)金属强化；(3)特殊条件下金属强度。

§1　晶体软硬实质

有些材料像金刚石、碳化硅、氧化铝等硬度很高，很难变形但很脆。另一些材料像铜、银、金等纯金属很软，容易加工成型但强度不高。而另外一些材料像钢铁、硬铝等似乎兼具上述两种材料的优点。上述两种硬软不同的材料其屈服强度与温度关系也是明显不同的。(见图6-1)。软的那类材料在所有温度下强度都不高。而硬的那类材料，只有在高温($T>0.5Tm$)才表现出塑性，而在$T<0.5Tm$范围内，温度降低屈服强度急骤上升。钢、硬铝等材料的屈服强度规律也介于二者之间。低温下($T<0.15Tm$)屈服强度很高，表现脆性。室温以上屈服强度显著降低。现在要探讨的问题是哪些因素决定晶体是硬还是软。

一、晶体的理论强度

设晶体的屈服对应于两层原子面之间发生刚性滑移。令a表示原子层间距，b表示滑移方向的点阵周期。弹性理论求得理论屈服应力 σ_t 近似地等于：

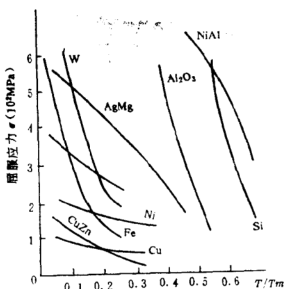


图6-1　屈服强度与温度

$$\sigma_t = \frac{G}{2\pi} \cdot \frac{b}{a} \tag{6-1}$$

对于简单立方晶体，$b=b$故$\sigma_t \simeq G/6$。对于面心立方晶体，作(111)[11$\bar{2}$]切变时，$b=a/\sqrt{2}$，$\sigma_t \simeq G/9$，对于层状结构的石墨，$b=0.4a \therefore \sigma_t \simeq G/15$。有人对各类晶体的$\sigma_t$值作了更精确的计算，结果如表6-1所列。一般说来晶体的理论屈服强度为$G/10$。将晶体的G值代入得出金属的σ_t的数量级为10^3MPa。实际金属单晶体的临界切应力是随试样的纯度、位错密度等不同而有差异，但一般数量级在$10^{-1} \sim 10^0$MPa，比理论屈服强度低好几个数量级。这表明实际金属单晶的屈服不是原子面相对作刚性滑移的结果，而是位错运动的结果。据此推想若将金属晶体中的位错全部清除，并将其他可以引起应力集中的因素，例如表面刻痕、夹杂物等也完全去掉，它的屈服强度应该等于均匀形成位错圈的切应力，这就接近σ_t。金属晶须的实验结果证实了这一点。（见表6-2）。

表6-1 理论屈服强度的计算值

材　料	滑移面和方向	切变模量G (10^4MPa)	σ_t/G	σ_t 10^4Mpa
铜(10°K)	{111} ⟨11$\bar{2}$⟩	3.25	0.028—0.039	0.91—1.27
铜	{111} ⟨11$\bar{2}$⟩	3.02	0.028—0.039	0.84—1.18
金	{111} ⟨11$\bar{2}$⟩	1.86	0.028—0.039	0.52—0.72
银	{111} ⟨11$\bar{2}$⟩	1.93	0.028—0.039	0.54—0.75
铝	{111} ⟨11$\bar{2}$⟩	2.25	0.028—0.039	0.64—0.88
铝	{111} ⟨1$\bar{1}$0⟩	2.25	0.114	2.57
锌	{0001} ⟨10$\bar{1}$0⟩	3.7	0.034	2.25
铁	{1$\bar{1}$0} ⟨111⟩	5.9	0.11—0.13	6.5
钨	{1$\bar{1}$0} ⟨111⟩	14.7	0.11—0.13	15.9
金刚石	{111} ⟨1$\bar{1}$1⟩	49.5	0.24	119
硅	{111} ⟨1$\bar{1}$0⟩	5.6	0.24	13.4
石　墨	{0001} ⟨10$\bar{1}$⟩	0.23	0.05	0.113
NaCl	{110} ⟨1$\bar{1}$⟩	2.32	0.120	2.77
Al_2O_3	{0001} ⟨10$\bar{1}$0⟩	14.4	0.115	16.6

表6-2 晶须的屈服强度

材　料	临界切应力τ_m 10^4MPa	τ_m/μ
铜	0.78	0.022
银	0.69	0.031
铁	3.51	0.060
镉		0.033—0.069
NaCl	0.53	0.030

二、晶体实际屈服强度的估计

上述讨论得出晶体的理论强度是晶体屈服强度的上限，即晶体处于最硬状态。阻碍位错滑移的晶格摩擦力则是屈服强度的下限，即晶体处于最软状态。从简化模型导出的晶格摩擦力的表达式为

$$\tau_{P-N}=\frac{2G}{1-\nu}\exp(-4\pi\zeta/b) \tag{6-2}$$

式中，$\zeta=\dfrac{a}{2(1-\nu)}$表示位错半宽度，将ζ值代入。可以看出$b/2\pi a$的大小对$\tau_{P-N}$的影响很大。由于$\sigma_t=\dfrac{G}{2\pi}\dfrac{b}{a}$，所以可以说$\tau_{P-N}$决定于$\sigma_t/G$。从表6-1所列的各种材料的$\sigma_t/G$值可以作出如下判断。密排金属的$\sigma_t/G$最小，$\tau_{P-N}$应该最小。体心立方金属的$\tau_{P-N}$高一些，而金刚石、硅等这些共价键晶体的$\tau_{P-N}$最高。另外从(6-2)式还可得出$\nu$对$\tau_{P-N}$也有影响，$\nu$愈大则$\tau_{P-N}$愈小。金属的$\nu$最大(0.3～0.4)，硅和锗次之(～0.28)，而Al_2O_3、金刚石等最小(ν～0.2)。上述的不同材料类型在σ_t/G和ν上的差别无非是由于原子键类型不同。金属键没有方向性，键合能对原子体积很敏感，而对近邻原子排列方位并不敏感，因而τ_{P-N}很小。共价键有强烈的方向性，而在位错核心区域正常的价键往往不能保持，再加上共价键晶体不能采取密集结构，因此τ_{P-N}值较大。

概括起来，按照原子键类别可将晶体分为软硬两类，软的晶体，τ_{P-N}远低于理论屈服强度，位错易动、塑性好，金属基本上属这一类。硬的晶体，τ_{P-N}接近理论屈服强度，室温时位错基本上不能动，呈现脆性，共价晶体属于这一类。当然这两类区分不是绝对的，例如体心立方结构的过渡金属，低温时，τ_{P-N}明显升高，导致该类金属有低温脆性。其原因可能是体心立方结构的

金属中含有部分的共价键。另外，还可以通过合金化、加工、热处理等手段去改变晶体的软硬。

§2　三类晶体的屈服现象

在拉伸曲线上表现出三种不同类型的宏观屈服过程。一类是拉伸曲线连续变化，没有明显的屈服点。如图6-2的曲线(1)所示。属这类的晶体有面心立方和密集六方结构的纯金属。第二类是拉伸曲线上有明显的屈服点如图6-2中的曲线(2)，屈服以后应力陡然下降。共价晶体属这一类。第三类是拉伸曲线上虽有明显的屈服点，但屈服以后应力下降不如第二类明显而且是缓慢不连续的，图6-2中曲线(3)。含少量间隙元素的体心立方金属属这一类。

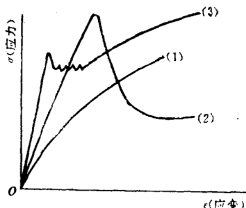


图6-2

一、屈服曲线方程

宏观屈服前，试样中位错已经开始运动，引起少量塑性变形。所以宏观屈服已涉及到位错增殖和运动位错受阻的问题。实验得出位错运动速率v和它所受到的有效力σ^*之间存在以下关系：

$$v=(\sigma^*/\sigma_0)^m \qquad (6\text{-}3)$$

式中，m和σ_0是与材料有关的常量。又知形变速率ε与位错运动速率v的关系为：

$$\dot{\varepsilon} = \Omega\rho_m vb \tag{6-4}$$

式中，ρ_m为可动位错的密度，Ω为比例因子。因形变过程中位错在不断增殖，同时又有部分位错受阻而成为不可动位错。设f_0和f分别表示原有的位错和增殖的位错中可动位错所占的比例。假定位错增殖与形变度ε的a次幂有关，则ρ_m与形变度的关系为：

$$\rho_m = f_0\rho_0 + fc\varepsilon^a \tag{6-5}$$

实验测得$a \sim 0.8$，$c \sim 1.6 \times 10^9 \mathrm{cm}^{-2}$。在塑性形变过程中作用于位错的有效应力比实际外加应力σ要小，因为有一部分用来克服内应力场。设内应力随形变ε增加而线性增大，有效应力就可表示为$\sigma^* = \sigma - q\varepsilon$（$q$为加工硬化系数），将它代入(6-3)式求出：

$$\sigma = q\varepsilon + \sigma_0 v^{\frac{1}{m}} \tag{6-6}$$

应用(6-4)式消去v，再用(6-5)式消去ρ_m，就求得屈服过程中应力应变曲线的解析式：

$$\sigma = q\varepsilon + \sigma_0(\dot{\varepsilon}/\Omega\rho_m b)^{1/m}$$

$$= q + \sigma_0\left[\frac{\dot{\varepsilon}}{\Omega b(f_0\rho_0 + fc\varepsilon^a)}\right]^{1/m} \tag{6-7}$$

式中，第一项和ε成正比，表示通常的线性加工硬化项，第二项随ε增大而减小。

二、对屈服曲线方程的理解

从(6-7)式可以解释三类晶体的屈服现象。如果第二项随ε的下降比第一项的增大更快时，两项叠加在一起，就表现出明显的屈服降落。（见图6-3）。由此可以看出影响屈服降落的主要材料参量有原始的可动位错及位错速率的应力敏感指数m。一般面心立方和密集六方金属的m很大见表2-3且$f_0\rho_0$也大。(6-7)式的第二项下降不明显，故没有明显屈服点。锗、硅等共价晶体的m很

小，ρ_0也小，因而具有很明显的屈服点。体心立方的m介于前二类晶体之间，由于原生晶体中位错都被杂质牢牢钉扎，虽然ρ_0并不小，但$f_0 \to 0$。这样(6-7)式中第二项下降不如共价晶体的明显，因而理论也预期有明显屈服点出现。

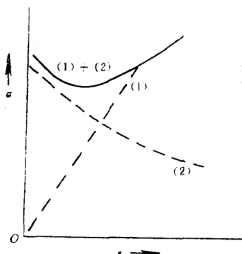


图6-3 屈服应力曲线示意图

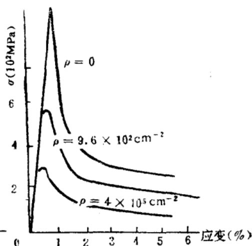


图6-4 不同位错密度锗晶体屈服现象

图6-4表示了实验测定的不同位错密度的锗晶体的拉伸曲线。从图看到，随ρ_0减少，屈服降落逐渐明显。基本上符合上述理论。

位错理论对屈服现象的了解，不但阐明了实际晶体的屈服规律而且指导如何改善材料的性质。深冲薄钢板常因吕德斯带的出现使表面不平整而造成废品。如果在深冲前将钢板轻微地辗轧一下，或者在钢材中加入少量的铝、钛、钒等元素以形成稳定的氮化物或碳化物，就可以避免吕德斯带出现，深冲钢板就平滑光洁。因为钢中的间隙元素碳、氮已用于化合物的形成，钢中原始位错避免了钉扎。

§3 流变应力与位错密度

晶体变形到屈服以后再继续形变则进入加工硬化阶段。此时晶体的位错密度明显增加，流变应力不断增大。实验得出晶体的流变应力σ与位错密度ρ的关系为：

$$\sigma=\sigma_0+\alpha Gb\rho^{1/2} \tag{6-8}$$

这就是Bailey-Hirsh关系。σ_0相当$\rho=0$时晶体的流变应力，也就是代表位错交互作用以外的因素对位错运动的阻力。Bailey-Hirsh关系对面心立方和体心立方晶体都适用。

流变应力和位错密度的$\frac{1}{2}$次方关系可用位错间交互作用来解释。但是位错交互作用有：平行位错间互作用，林位错交互作用和位错胞壁的作用等。从下面的讨论表明不管用何种模式都可以求出流变应力 的增加与$\rho^{\frac{1}{2}}$的关系。所以单独根据σ与ρ的关系还难以判断晶体的加工硬化的具体机制。

一、平引位错间互作用机制

设晶体中的位错是平行均匀分布的。(见图6-5)。形变过程中位错不断增殖，位错密度ρ增加，但位错间距离γ不断减小。ρ与r的关系为$\rho\gamma^2=1$，平行位错间的互作用$\Delta\sigma$：

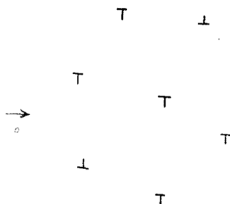


图6-5 均匀分布的位错图

$$\Delta\sigma = \alpha' Gb/2\pi r \qquad (6\text{-}9)$$

$$= \alpha' Gb/2\pi\rho^{-\frac{1}{2}} = \alpha Gb\rho^{\frac{1}{2}}$$

上述模式也可以推广到位错分布不均匀的情况。设位错聚集成许多平行的塞积群，群内位错平均数为n，塞积群之间距离为γ，则$r^2\rho = n$。位错塞积群互相作用为：

$$\Delta\sigma = \alpha'(nb)G/2\pi r = \alpha Gb(n\rho)^{1/2} \qquad (6\text{-}10)$$

所以　　$\sigma = \sigma_0 + \Delta\sigma = \sigma_0 + \alpha Gb(n\rho)^{1/2}$

二、与林位错互作用机制

形变时晶体可能有多个滑移系统起作用。不同滑移系统增殖的位错可以起到障碍作用。假定阻碍位错滑移运动的主要是与主滑移系统相交的次滑移系统上的位错，(称为林位错)。当滑移位错与林位错相交后可能引起割阶或反应形成新的位错或绕过林位错增长了位错线。不管哪种情况都需要消耗能量。滑移过程中林位错密度增加，因此割阶数目增加、新位错增多或者位错线增长，都导致阻力增大。今以位错切过林位错形成割阶为例推求流变应力与位错密度的关系。

设林位错之间的距离为r_f，林位错密度为ρ_f，则$r_f^2\rho_f = 1$。滑移位错切过林位错形成割阶。设d为割阶宽度，则形成割阶的能量$U_f \simeq \frac{1}{30}Gb^2d$。令$\Delta\sigma$为林位错对滑移位错的作用力，则：

$$\Delta\sigma b l_f d = U_f = \frac{1}{30}Gb^2 d$$

$$\Delta\sigma = \frac{1}{30}Gb/l_f \qquad (6\text{-}11)$$

所以　　$\sigma = \sigma_0 + \alpha Gb\rho_f^{1/2}$

滑移位错与林位错作用的其他机制也可以推求类似表达式，只不过表达式中的α值不同。

三、位错胞壁作用机制

实验见到层错能高的金属如铝等在较大形变后，晶体中形成位错胞。胞内位错很少而胞壁上位错密集。因胞壁上的位错组态是不规则的，其应力场难以确切计算。C.M.Li.James采用了一个简化模型。设胞壁是由彼此交叉夹角为ω的两组平行的螺位错组成的。

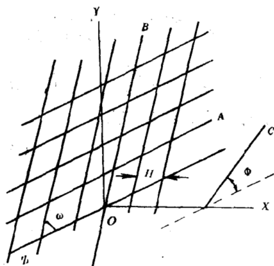


图6-6　位错墙与墙外位错C交互作用

（见图6-6）。这种位错组态的应力场可以计算出来。令Z轴与A组位错线平行，Y轴在胞壁内。A组位错在(xy)处的应力场为：

$$\sigma_{zx}=-\frac{Gb}{2\pi}\sum_{-\infty}^{\infty}\frac{y+nH}{(y+nH)^2+x^2}=-\frac{Gb}{2H}\frac{\sin2\lambda}{\cos h2\alpha-\cos2\lambda}$$

$$\sigma_{zy}=\frac{Gb}{2\pi}\sum_{-\infty}^{\infty}\frac{x}{(y+nH)^2+x^2}=\frac{Gb}{2n}\frac{\sin h2\alpha}{\cos h2\alpha-\cos2\lambda}$$

式中，H为平行螺位错间距，$\alpha=\frac{\pi x}{H}$，$\lambda=\frac{\pi y}{H}$，B组位错的应力场可以将A组位错的应力场经坐标变换求出，结果如下：

$$\sigma_{xx}=0\qquad\sigma_{yy}=-\frac{Gb}{2H}\frac{\sin2\omega\sin h2\alpha}{\cos h2\alpha-\cos2\rho'}$$

$$\sigma_{xy}=\frac{Gb}{2H}\ \frac{\sin\omega\sin2\rho'}{\cosh2\alpha-\cos2\rho'}$$

$$\sigma_{xz}=-\frac{Gb}{2H}\ \frac{\cos\omega\sin3\rho'}{\cosh3\alpha-\cos2\rho'}$$

$$\sigma_{yz}=\frac{Gb}{2H}\ \frac{\cos2\omega\sinh2\alpha}{\cosh2\alpha-\cos2\rho'}$$

式中，$\rho'=\lambda\cos\omega+\frac{\pi Z}{H}\sin\omega$，胞壁的应力场为$A$，$B$两组位错应力场的相加，结果如下：

$$\sigma_{xx}=0 \qquad \sigma_{yy}=-\sigma_{zz}=-\frac{Gb}{2\pi}\ \frac{\sin2\omega\sinh2\alpha}{\cosh\alpha-\cos2\rho'}$$

$$\sigma_{xy}=\frac{Gb}{2\pi}\ \frac{\sin\omega\sin2\rho'}{\cosh2\alpha-\cos2\rho'}$$

$$\sigma_{xz}=-\frac{Gb}{2\pi}\left(\frac{\cos\omega\sin2\rho'}{\cosh2\alpha-\cos2\rho'}+\frac{\sin2\lambda}{\cosh2\alpha-\cos2\lambda}\right)$$

$$\sigma_{yz}=\frac{Gb}{2\pi}\left(\frac{\cos2\omega\sinh2\alpha}{\cosh2\alpha-\cos2\rho'}+\frac{\sinh2\alpha}{\cosh2\alpha-\sin2\lambda}\right)$$

(6-13)

当$x\to\infty$ tanhx→1，因而(6-12)式简化为：

$$\sigma_{xx}=\sigma_{xy}=\sigma_{xz}=0$$

$$\sigma_{yy}=-\frac{Gb}{2\pi}\sin2\omega$$

$$\sigma_{yz}=\frac{Gb}{2\pi}(2\cos^2\omega) \qquad (6\text{-}13)$$

设胞壁外有一螺位错C，它与Z轴的夹角为ϕ，离胞壁距离为x，而且$x\gg H$可近似为∞，这样胞壁对螺位错C的作用力为：

$$F=(0\ \ b\sin\phi\ \ b\cos\phi)\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{yz}\\ 0 & \sigma_{yz} & -\sigma_{yy}\end{pmatrix}\times \vec{l}_0$$

$$=\frac{Gb^2}{H}\cos\omega\cos(2\phi+\omega)$$

式中，$\vec{l}_0$是C位错的位错线单位向量，所以$\vec{l}_0=\sin\phi(\vec{j})+\cos\phi(\vec{k})$。因为$H$是螺位错间距，故有$\rho H^2=1$。因而，

$$\sigma=\sigma_0+Gb\cos\omega\cos(2\phi+\omega)\rho^{1/2} \tag{6-14}$$

§4 加工硬化

晶体的加工硬化现象在力学行为上表现为形变量ε增加，流变应力增大。实验表明单晶体的加工硬化曲线如图6-7所示，一般可分为三段。

一、硬化三阶段的描述

开始为片流滑移段。其特征是硬化率$\theta_I(=\frac{d\sigma}{d\varepsilon})$很低，滑移线细而长。被称为第一阶段。硬化第一阶段是对应单一滑移系统起作用的阶段，所以不是任何取向的单晶体在拉伸变形曲线上都能观察到第一阶段的。多晶体试样当然观察不到这一阶段。第一段以后继续变形，易滑移系统受阻，其他滑移系统开始起作用，即进入了多种滑移系统共同起作用的线性硬化阶段—被称为第二硬化阶段。该阶段的特征是硬化率θ_{II}为常量，对面心立方金属来说$\theta_{II}\simeq G/300$。滑移线粗短，其平均长度(L)与形变量有关，$L=\Lambda/\varepsilon^*$。其中Λ为材料常量，$\varepsilon^*=\varepsilon-\varepsilon_I$($\varepsilon_I$为第一阶段结束

时形变量）。继续变形就进入硬化第三阶段。该阶段的特点是形变度ε增加，硬化系数θ_{III}减小，故又称为抛物线型硬化阶段。鉴于第三阶段开始的应力τ_3和θ_{III}都随温度增加而减小，这一阶段又可称为动态回复阶段。从滑移形貌看来，滑移带的出现是其主要特点。形变量增加，带与带之间不出现新的滑移线，形变集中在原有带中进行，并发生滑移带碎化现象，在碎化的地方还出现交滑移线。这些特征对第三阶段位错加工硬化理论的提出至关重要。

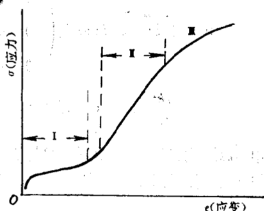


图6-7　面心立方单晶体的形变曲线

加工硬化是金属中一个古老而又普遍的问题。位错理论开始提出时就注意到加工硬化现象。理论解释至今已有十几种之多，还在不断深入，因为它涉及大量位错的运动和其相互作用。尽管各派理论各有千秋但还有许多共同点。下面通过Seeger和Hirsh 提出的理论的概述来说明位错理论如何处理加工硬化问题。

二、位错理论对加工硬化的解释

1．关于硬化的第一阶段没有分歧意见。各派理论都认为是单一滑移系统的问题。设位错源一次激活以后产生出n个位错于障碍物前塞积起来。其平均滑移的距离为塞积群长度L(滑移带长度)的$\frac{3}{4}$。故位错激活后，应变与位错数目应有以下关系：

$$d\varepsilon=\left(\frac{3}{4}L\right)^2 b\,\frac{dn}{x} \tag{6-15}$$

式中，x为滑移面间距。当dn个位错环产生后 必定给位错源一个反作用力，它阻碍位错源激活，其近似值为：

$$d\sigma = \frac{Gbdn}{2\pi\left(\frac{3}{4}L\right)} \tag{6-16}$$

由(6-15)和(6-16)两式得出θ_I为

$$\theta_I = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{2}{3}\frac{G}{\pi}\left(\frac{x}{L}\right)$$

更精确的计算给出

$$\theta_I = \frac{8}{9}\frac{G}{\pi}\left(\frac{x}{L}\right)^{3/4} \tag{6-17}$$

取$x = 3\times10^{-2}$nm，$L = 0.5$mm得出$\theta_I \sim 3\times10^{-4}G$，与实验值相近。

2．关于加工硬化的第三阶段，各派理论也都认为起决定作用是螺型位错在热激活过程中的交滑移。形变过程中位错不断塞积于障碍物前，领先位错受到愈来愈大的切应力作用，这样就导致螺位错通过交滑移方式越过障碍，使滑移得以继续进行，所以硬化系数降低。Shoeck和Seeger曾求得交滑移激活能E_c和交滑移频率νc与外加切应力τ的关系：

$$E_C = E_0 - c\ln\frac{n\tau}{\tau_0} \tag{6-18}$$

$$\nu_C = \nu_0\exp(-E_C/k_BT) \tag{6-19}$$

式中，E_0是无外力时的交滑移激活能，τ_0为交滑移面内的分切应力，c为常数。假定交滑移速率$\beta\nu_c$达到实际形变速率a时认为是第三阶段开始，则可以求得：

$$\ln\tau_3 = A - BT \tag{6-20}$$

式中，$A=\frac{E_0}{c}+\ln\frac{\tau_0}{n}$，$B=\frac{k}{c}\ln\frac{\beta v_0}{a}$。这一结果得到实验证实。

上述交滑移机制很容易说明高层错能的金属(如铝等)，第三阶段到来较早和金属形变后产生胞状结构的实验事实。层错能愈高，位错扩展宽度愈窄，交滑移容易进行(E_0小)，所以标志第三阶段开始的切应力τ_3较小(从6-20式推知)，即第三阶段较早到来。当第三阶段到来时，塞积群中螺位错与另一塞积群中的反号螺位错在交滑移面内相互消毁。留在原滑移面内和交滑移面内的就是如图6-8所示的两群刃型位错。在形变温度不高，攀移难以进行的情况下就形成胞状结构。交滑移机制也能很好说明在硬化第三阶段，滑移线主要在原滑移带内形成。因为塞积的位错攀移后，位错源又重新激活放出位错。

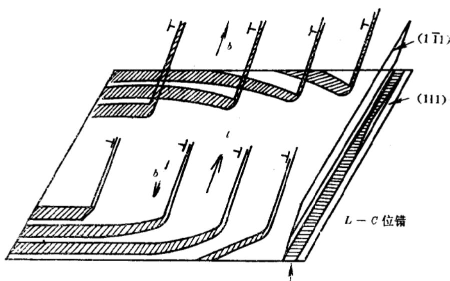


图6-8 交滑移产生胞状结构 $\bar{b}$—柏氏矢量 t—位错运动矢量

3. 关于加工硬化的第二阶段虽然研究得最多但直到目前仍然存在着争论，当然存在着许多共同点。首先讨论共性部

分。

应变量的增加可以来自位错源释放出新的位错也可以来自被阻位错冲破障碍继续运动。但不管是哪派理论都只考虑前者，因为实验见到，在第二阶段，滑移线往往是突然形成的。显然是位错源放出新位错的结果。

设应变量增加$d\varepsilon$，单位体积中位错源释放了dN个位错，每个位错可以运动的平均自由径为λ，则：

$$d\varepsilon = b\rho\lambda^2 dN \tag{6-21}$$

从位错源释放的位错环长度l正比于平均自由径，即$l = q\lambda$。单位体积中位错长度$d\rho$(位错密度)$= q\lambda dN$，代入(6-21)式，得到：

$$d\varepsilon = \frac{p}{q} b\lambda d\rho \tag{6-22}$$

与第一阶段不同，形变过程中位错运动的平均自由径在不断减小，就是说限制位错滑移的位垒不断增多。对位垒成因的不同认识是各派理论差别的关键。例如Seeger和Hirsch理论之间的区别就在于强调位垒不同。

(1) Seeger理论认为限制位错滑移的位垒是面角位错。它是在形变过程中主、次滑移系统中的位错按第五章所讨论的反应机制形成的。因面角位错是不可动的，可以起到位垒作用。形变量增加，面角位错增多，它们之间间隔减小，使位错运动的自由径减小，故晶体逐渐变硬。设面角位错间隔为L。(见图6-9)。则$px_2 = L_2$，$q\lambda = 4L$。因$\lambda = \frac{L}{2}$，所以(6-22)式中的$p = 4$，$q = 8$。由于实验发现在硬化第二阶段，滑移线长度与$\frac{\Lambda}{\varepsilon - \varepsilon_I}$量成正比，故有理由假定，$\lambda = \frac{1}{2}\frac{\Lambda}{\varepsilon - \varepsilon_I}$。将上述诸关系式代入(6-22)

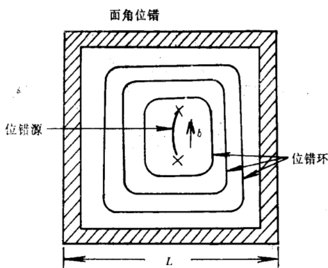


图6-9　面角位错封住位错群

式得：　$d\varepsilon=\frac{b\Lambda}{4(\varepsilon-\varepsilon_I)}d\rho$

积分后：$(\varepsilon-\varepsilon_I)=\frac{1}{2}(\Lambda b\rho)^{1/2}+c$　　(6-23)

设每一面角位错圈所围的塞积群中的位错数目为n个，则根据(6-10)式得出：

$$\sigma=\frac{Gb}{2\pi}\left(\frac{n\rho}{2}\right)^{1/2}\tag{6-24}$$

式中，$\frac{1}{2}$来自均匀分布的平均。由(6-23)式和(6-24)式求出：

$$\theta_{II}=\frac{d\sigma}{d\varepsilon}=\frac{G}{2\pi}\left(\frac{nb}{\Lambda}\right)^{1/2}\tag{6-25}$$

根据滑移线的实验结果得出$n\sim25$，$\Lambda\sim10^{-3}$ cm，代入(6-25)式，求得$\theta_{II}\sim G/300$。和实验结果相符。

(2) Seeger 理论虽有不少成功处，例如很好地说明了$\theta_{II}\sim$

$G/300$的实验结果。但是除少数情况外，没有见到形变过程中位错明显塞积，因此Hirsh人提出了次滑移系统的位错(称为林位错)是位错滑移位垒的理论。Hirsh等研究铜单晶的加工硬化，发现随形变量增加，次滑移系统的位错密度不断增加，到硬化第二阶段，次滑移系统上的位错密度几乎与主滑移系统的相当，而且有清晰的胞结构形成，无疑表明第二阶段硬化是次滑移系统的位错对原滑移位错作用的结果。次滑移系统的位错密度不断增加导致材料逐渐变硬。与 Seeger 理论一样 Hirsh 理论也假定一种相似性原理。认为随形变量增加，位错密度虽不断变化，但位错分布图象基本相似。设林位错之间的间隔为 l_f，即 $\lambda=\frac{1}{2}l_f$。与推导(6-23)式相同过程可以导出下式：

$$\varepsilon-\varepsilon_I=\frac{1}{2}(\Lambda b\rho)^{1/2}+c \tag{6-26}$$

因林位错是位错滑移位垒，根据(6-11)式得出流变应力σ为：

$$\sigma=\alpha Gb\rho_f^{1/2} \tag{6-27}$$

在硬化第二阶段，主滑移系统中位错增殖与次滑移系统中位错增殖同步进行，可以假定$\rho=k^2\rho_f$。由此从(6-26)和(6-27)式得出：

$$\theta_{II}=\frac{2\alpha G}{K}\left(\frac{b}{\Lambda}\right)^{1/2} \tag{6-28}$$

式中，$\alpha\simeq\frac{1}{2\pi}$，若$\Lambda$仍为$10^{-3}$ cm，则选$K\simeq0.4$就可以满足$\theta_{II}\sim G/300$的实验结果。Matsuda用α-Fe单晶做实验得出ρ与ρ_f为线性关系。这是对Hirsh理论的支持。

§5 晶体的断裂

随材料、温度、应力状态、加载速度的不同，断裂表现出多

种类型。根据断前发生塑性形变情况，大体可以分为两类：(1)试样断裂前已经历大量的塑性形变—韧性断裂，(2)断前试样在表现上没有明显的塑性形变—脆性断裂。有的材料由于形变条件变化可以发生韧脆转变。有人把这种材料称为半脆性材料。

一、脆性断裂

断裂面与张应力σ接近正交。单晶体试样中表现为沿解理面断裂，多晶体可能出现两种情况；沿解理面穿晶断裂或沿晶界断裂。后者与晶界上存在脆化因素如沉淀相、溶质原子偏聚等有关。这里只讨论沿解理面穿晶断裂问题。

1．Griffith理论。若将断裂理解为完整晶体在正应力作用下沿某一原子面断开，则估计得出断裂强度（称为理论强度）为$(\frac{1}{5}\sim\frac{1}{10})E$。$E$为杨氏模量，但实测的断裂强度只有理论值的$10^{-2}\sim10^{-3}$，为了解决这一矛盾，Griffith提出了断口理论。此理论认为由于晶体早已存在着微裂口，它引起应力集中使晶体的实际强度远比理论值低。

设试样为一单位厚度的薄板，中间有一长度为2C的裂口（见图6-10）。在正应力σ的作用下裂口扩展，晶体断裂。裂口扩张松弛了弹性能U_1，但增加了表面能U_2。根据能量极小原理可以推导出裂口扩展的临界应力σ_c。

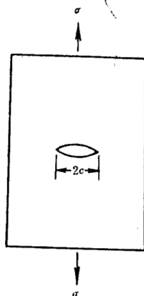


图6-10 Griffith裂口示意图

$$\text{因为} U_1 = -\frac{\sigma^2}{2E}(\pi c^2)$$

$$U_2 = 2(2c\gamma) \tag{6-29}$$

从$\frac{d}{d_c}(U_1+U_2)=0$ 求出σ_c为：

$$\sigma_c=\left(\frac{2E\gamma}{\pi c}\right)^{1/2}\simeq\left(\frac{E\gamma}{c}\right)^{1/2}$$

较精确估计得出σ_c为：

$$\sigma_c=\left[\frac{4\gamma E}{\pi(1-\nu^2)c}\right]^{1/2} \tag{6-30}$$

式中，γ为单位面积裂口的表面能。

将σ_c与理论断裂强度σ_t比较得出：

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_t}=\frac{(E\gamma/c)^{1/2}}{(E\gamma/a)^{1/2}}=\left(\frac{a}{c}\right)^{1/2}$$

式中，a为晶体的晶格常数，它比微裂口长度c小许多。由此可说明实际强度比理论值低许多，如果晶体中早已存在微裂口的话。但为要说明二者差100倍，则要求晶体在断裂前就已存在长度$c\simeq 10^{-4}$cm的裂口。

一般说来如玻璃、硅等脆性材料由于杂质或表面损伤等原因在断裂前已存在微裂口是完全可能的。钱临照用钠烝汽缀饰法显示出玻璃中存在这类裂口。苏联学者越飞的食盐晶体实验支持裂口理论。为了解释金属中存在线度理论值低1000倍，要求金属中存在线度 大于2×10^{-2}cm的裂口。一般说来金属中并不会预先存在这样 长 的裂口。(这样长的裂口在显微镜下已经可见了）。另外Griffth 裂口理论也不能解 释 金 属中出现的韧脆转变现象。因此金属材料的脆断问题需另作研究。

2. 裂口形成问题。研究表明：在 典 型脆断的断裂区附近有少量的塑性形变，因此裂口的形成定与位错堆积有关。基本思想是金属材料虽预先并不存在足以导致脆断的一定长度的裂口，但少量形变后，堆积的位错会导致裂口形成，随后在应力作用下裂口

扩展导致断裂。关于裂口形成提出过多种设想。例如滑移带塞积，两组滑移系中位错的汇合以及两个滑移带相交或位错墙侧移等(见图6-11)。并估计了形成裂口的临界应力。

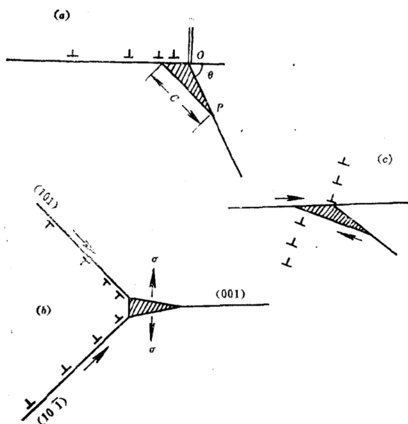


图6-11 裂口形成的位错模型

(a) 位错塞积 (b) 位错汇合 (c) 位错墙侧移

(1) Stroh等认为位错障碍物前堆积形成位错塞积列(图6-11(a))。当位错列在某点的应力接近理论值时就形成裂口。塞积位错列在$P(c、\theta)$点的正应力为：(见5-23式)

$$\sigma_P^N=\sigma_0\left(\frac{L}{c}\right)^{1/2}f(\theta)$$

式中，L为塞积列长度，$f(\theta)$的表达式见(5-23)式。若产生长度为c的裂口，要求临界应力为σ_c。所以当$\sigma p^N = \sigma_c$时，裂口形成。由此求出材料脆断的应力σ_s(因为脆断时，形变量很小，可用屈服强度σ_y表征断裂强度)：

$$\sigma_y^2 = 8G\alpha/[\pi(1-\nu) \quad Lf^2(\theta)] \tag{6-31}$$

Stroh求出$f(\theta)$函数当$\theta = 70.5$时最大，代入(6-31)式就求得形成裂口的临界切应力：

$$\sigma_y = [3\pi\alpha G/8\ (1-\nu)L]^{\frac{1}{2}} \tag{6-32}$$

由(5-17)式得知塞积列长度L：

$$L \simeq Gbn/[\pi(1-\nu)\sigma_y]$$

代入(6-32)式求出裂口形成所需的塞积在障碍物前的位错个数n为：

$$n = 3\pi^2\gamma/8\sigma_y b \tag{6-33}$$

将有关值$b \sim 10^{-8}$cm，$\gamma \sim 10^3$ergs/cm² $\sigma_y \sim 160$MPa代入求出$n \sim 100$。这样多的位错塞积，一般在金属晶体脆断时并不常见，因此一定存在其他类型的裂口形核机制。而且一般六方结构金属，其滑移与解理面为同一平面而不是象理论预言的成70.5°

(2) 鉴于裂口形成的位错塞积理论缺乏普遍意义以及存在的问题。Cottrell提出了裂口形成的位错汇合理论。该理论能较好说明体心立方金属的脆断问题。体心立方金属的滑移系是(101)[111]。图6-11(b)是Cottrell提出的裂口形核模式。设(101)和(10$\bar{1}$)两个滑移面上的[$\bar{1}\bar{1}$1]和[111]位错运动到滑移面交线上汇合形成新的位错，其反应式为：

$$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1] + \frac{1}{2}[111] \rightarrow [001]$$

因为(101)和(10$\bar{1}$)滑移面的交线是[010]方向，故汇合形成的[001]新位错是刃型位错，它的滑移面是(0$\bar{1}$0)面，所以是不可动

的。这类不可动位错堆积就形成解理面为(100)面 的 裂口。裂口形成时能量W的变化为：

$$W=\frac{nGb^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{2R}{\left(\frac{c}{2}\right)}+2\gamma c-\frac{\pi(1-\nu)\sigma^2c^2}{8G}-\frac{\sigma bc}{2} \tag{6-34}$$

式中，第一项是n个堆积位错的应变能，第二项为裂口形成(裂口长为c)的表面能，第三项为裂口形成后松弛的弹性能．第四项为外加正应力σ在裂口形成时所作的功。

令$c_1=Gn^2b^2/8\pi(1-\nu)\gamma \qquad c_2=8G\gamma/\pi(1-\nu)\sigma^2$

则(6-34)式改写为：

$$W=2\gamma\left[c_1\ln\left(\frac{4R}{c}\right)+c-\frac{c^2}{2c_2}-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}c\right]$$

由$\frac{\partial W}{\partial c}=0$得出：

$$c^2-\left[1-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}\right]cc_2+c_1c_2=0$$

从方程式解得：

$$c=\frac{1}{2}\left[1-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}c_2\pm\sqrt{\left[1-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}\right]^2c_2^2-4c_1c_2}\right] \tag{6-35}$$

根据C_1、C_2的大小可以分为三种情况：

(1) $\left[1-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}\right]^2c_2^2>4c_1c_2$，　　c有二个实根

(2) $\left[1-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}\right]^2c_2^2<4c_1c_2$　　c有二个虚根

(3) $\left[1-2\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/2}\right]^2c_2^2=4c_1c_2$　　c有二个相等的实根C_c

式中，C是裂口长度，C为虚值表示裂口是不稳定的，早已脆断。C_o是裂纹的临界长度。第一种情况下C的二个实根，其一大于C_o，表明裂口会自发扩展，另一个实根小于C_o，表明裂口将自动愈合。重要的是知道临界裂口形成的条件，从(6-35)式得出$\left(\frac{C_1}{C_2}\right)^{\frac{1}{2}}=\frac{1}{4}$，即$\sigma_c nb=2\gamma$是临界裂口形成的条件。

假定裂口是在屈服应力σ_y作用下通过不连续屈服形成的，滑移带的长度等于晶粒直径d。裂口形成后应力松弛，滑移带切位移量η等于位错的总矢量nb，所以晶体的切变量$\xi=\eta/(\frac{1}{2}d)$。将切变量与屈服应力联系起来：

$$G\left(\frac{\xi}{2}\right)=(\sigma_y-\sigma_i)$$

$$\therefore \quad nb=(\sigma_y-\sigma_i)\frac{d}{G}$$

根据Hall-Petch关系：$\sigma_y=\sigma_i+k_y d^{-\frac{1}{2}}$、从$\sigma_c=\frac{2\gamma}{nd}$得到：

$$\sigma_c=\frac{2G\gamma}{Ky}d^{-1/2} \tag{6-36}$$

位错汇合理论说明了脆断应力与晶粒度的关系。关于裂口形核的其他理论读者可参考文献。

3. 裂口的扩展。(6-36)式是裂口扩展的判断式。当外加应力$\sigma>\sigma_c$，裂口就能扩展。但是实际上是否会导致断裂还与裂口前沿因发生塑性变形消耗的能量大小有关。

裂口传播可以分为弹性和非弹性两部分。根据计算，当裂口扩展时弹性能量H_E的变化应为表面能γ和动能$\frac{V_c^2}{V_o^2}\left(\frac{H_E}{\beta^2}\right)$所平

衡。其中V_o为声速，V_c为裂口扩展速率，B为常量。即：

$$H_E = \gamma + \frac{V_c^2}{V_0^2}\left(\frac{H_E}{B^2}\right) \tag{6-37}$$

由此求出：

$$V_c = BV_0\left(1 - \frac{\gamma}{H_E}\right)^{1/2} \tag{6-38}$$

当裂口扩展前沿存在脆性形变时，(6-38)式改为：

$$V_c = BV_0\left(1 + \frac{\gamma + \gamma_p}{H_E}\right)^{1/2} \tag{6-39}$$

式中，γ_P是等效扩展前沿的塑性形变能。从(6-39)式看出γ_P大则裂口扩展速度V_c就小。Gillman 用不同速度冲击LiF 晶体，证实在一定的V_c以上，裂口扩展很快，裂口前沿来不及发生塑性变形，表现为脆断。

二、韧性断裂

韧性断裂的研究还比较少，可能是因为在工程上韧性断裂的危险性不象脆性断裂那样大。韧性断裂是一个缓慢撕裂过程。韧性断裂方式有三种：(1) 拉伸时出现颈缩，形成杯—锥型断口，(2) 拉伸时出现双杯断口，(3) 形成平面型切剪断口，例如5.5%Cu 的时效铝合金单晶，断口是平面型，但断裂平面是(111) 滑移面，与脆断时的解理断口完全不同。图(6-12)为上述三种断口示意图。

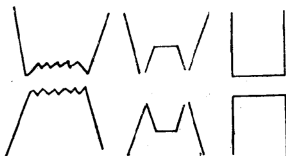


图6-12　三种韧性断口

拉伸形变过程中加工硬化引起强度增加$\Delta\sigma$，使试样的截面积缩小ΔA。形变一定量以后总负荷从σA改变为$(\sigma+\Delta\sigma)(A-\Delta A)$，所以总负荷改变量$\Delta F$为：

$$\Delta F=(\sigma+\Delta\sigma)(A-\Delta A)-\sigma A$$
$$\simeq A\Delta\sigma-\sigma\Delta A$$

因为$\Delta\sigma\Delta A$是二级无穷小故忽略。如果$\Delta F<0$，表明ΔA增大，试样再不能均匀变形而发生颈缩。颈缩形成后试样处于三轴应力状态。对颈缩附近的应力状态分析表明：一般说来，最大应力位于样品中心部位，它高出平均应力30～40%，故空洞往往首先在中心形成。应力增加，空洞扩大。中心空洞与四周空洞联结起来就导致韧性断裂。

如果金属中有第二相或夹杂物，由于基体与这些东西的联接往往较弱，因此空洞首先在第二相等周围形成。所以第二相等往往是断口韧窝的中心。

三、韧脆转变

随形变温度的降低，形变速度的增加或试样增厚，有的金属会变脆。图6-13为断裂应力σ_F，屈服应力σ_Y与温度关系的示意图。有的金属材料由于屈服应力对温度变化敏感，以至某一温度Tc以下，屈服应力大于断裂应力，这时金属材料就不发生塑性变形而断裂--脆断。图6-13是韧脆转变

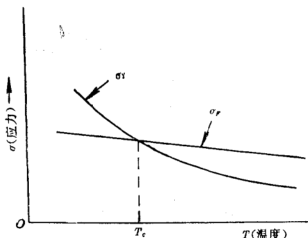


图6-13　韧脆转变的表象理解

的现象性理解。位错理论从位错的可动到受阻去考虑韧脆转变问题。

1．Stroh提出的理论认为任何形式的应力集中只可能导致二种后果。一是激活位错源，另一种是形成微裂口。前者导致韧性断裂，后者便促成脆性断裂。所谓脆性转变温度意指位错源不被激活的最高温度。一般位错源被激活是通过克服位垒实现的。设$U(\sigma)$为位垒，则单位时间内位错源被激活的几率p为：

$$p = \nu_0 \exp[-U(\sigma)/k_B T] \tag{6-40}$$

位错源保持不被激活的平均时间τ就应写成

$$\tau = \frac{c_0}{p} = \frac{c_0}{\nu_0} \exp[U(\sigma)/k_B T$$

故它在t时间内，不被激活的几率p为

$$p = \exp(-t/\tau) = \exp\left[-\frac{\nu_0}{c_0} t \exp(-U/k_B T\right]$$

$$\ln\ln\frac{1}{p} = \ln \nu t - U(\sigma)/k_B T$$

$\nu = \nu_0/c_0$，从上式可看出温度改变，p值将很快由1变为0，脆性转变温度Tc意指位错不被激活(即$p=0$)的最高温度。由此可近似求得：

$$Tc = U(\sigma)/k_B \ln \nu t \tag{6-41}$$

根据碳钢的转折温度，可以求得$U(\sigma) \simeq 0.28$ev，这和位错受杂质原子钉扎作用所计算的结果一致。

2．Petch等在研究α-Fe的基础上提出韧脆转变主要是由于晶格摩擦力随温度而变，以致某一温度以下屈服应力σ_y大于裂口形成的临界应力σ_c。在这儿把韧脆转变温度理解为$\sigma_y = \sigma_c$的温度。测定韧脆转变的试样一般是带预制缺口的。这时Hall-Petch式写

成

$$q\sigma_y = \sigma_i + kyd^{-\frac{1}{2}}$$

式中，q为缺口约束系数。从(6-36)式得出断裂应力(即裂口临界应力)σ_c为

$$\sigma_c = \frac{2G\gamma}{k_y d^{1/2}}$$

令$\sigma_c = \sigma_y$，求出：

$$\left(\frac{2qG\gamma}{ky} - ky\right)d^{-1/2} = \sigma_i \qquad (6\text{-}42)$$

式中，σ_i为晶格摩擦力可以分为为热的σt和非热的σ_n两部分。$\sigma_t = \sigma_t o\exp(-\alpha t)$，如果$\sigma_t$不是太大则从$\sigma_i = \sigma_n + \sigma_t$可以写成

$$\ln\sigma_i = \ln B - \beta T$$

代入(6-42)式便有

$$\ln\sigma_i = \ln B - \beta T = \ln\left(\frac{2qG\gamma}{ky} - ky\right) + \ln d^{-1/2}$$

整理后得到韧脆转变温度T_c的近似式

$$\beta T_c = \ln B - \ln\left(\frac{2qG\gamma}{ky} - ky\right) - \ln d^{-1/2} \qquad (6\text{-}43)$$

由此可见，脆性转变温度T_c与晶粒大小，晶格摩擦力，位错被钉扎的强度和缺口处三轴应力的情况等都有关系。

§6 固溶强化

固溶强化指的是溶质原子使基体的流变应力增加。流变应力变化的规律与晶体结构有很大关系。派纳力大的金属如体心立方

金属在一定条件下，溶质原子反而使基体的流变应力减小，呈现固溶软化现象。另外替代固溶和间隙固溶引起的强化规律也不相同。下面作分别介绍。

一、面心立方晶体固溶强化

位错理论的任务在于说明固溶浓度与强度提高之间的实验规律。各学派虽从不同角度去探讨，其共同点是把溶质原子作为阻碍位错运动的位垒。

1. Fleischer 理论。设溶质原子均匀分布于基体，浓度为 C(at%)。则厚为a(单原子层)的单位面积滑移面上溶质原子数为 ac/a^3。滑移面上溶质原子间的距离l为$l^2=a^3/ac$。位错在切应力 τ 作用下沿滑移面向前运动遇到障碍（固溶原子），位错线在障碍之间弓出，弯曲角为θ（见图6-14）。障碍对位错的作用力F

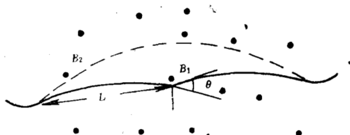


图6-14 计算L值采用的模型

将与位错的线张力T平衡，即：

$$F=2T\sin\frac{\theta}{2}$$

切应力 τ 增加，F也增大，当θ达到θ_c时，位错开始突破障碍继续前进。这时的切应力τ_c就是晶体的屈服应力。屈服应力τ_c可由下式求出：

$$\tau_c Lb=F_m=2T\sin\frac{\theta_c}{2} \tag{6-44}$$

式中，L为障碍间的距离，它不一定等于溶质原子间距l。问题在于求出L、θ_c和 l 的关系。

设位错被一系列间距为L的障碍所阻，切应力使位错克服障碍B_1，前进中又和障碍B_2相遇。位错扫过的面积A从图6-14求得：

$$A=\frac{1}{2}(2L)\ L\sin\frac{\theta_c}{2}$$

无疑位错扫过的面积A应与l^2成正比，即：

$$A=L^2\sin\frac{\theta_c}{2}\simeq l^2 \tag{6-45}$$

将(6-45)式代入(6-44)求得

$$\tau_c=\frac{2T}{Lb}\sin\frac{\theta_c}{2}\simeq\frac{2T}{lb}\left(\sin\frac{\theta_c}{2}\right)^{3/2} \tag{6-46}$$

又因为$\tau_c=F_m/Lb$，所以$\sin\frac{\theta_c}{2}=F_m/2T$，最后从(6-44)求出：

$$\tau_c=F_m^{3/2}c^{1/2}/ba(2T)^{1/2} \tag{6-47}$$

上式表明，固溶强化与溶质浓度$\sqrt{c}$成正比。

2. Labusch 理论。实际上即使溶质原子在基体中均匀分布，溶质原子对位错的作用也不会相同，因为它们与滑移位错的距离远近不同。基此Labusch提出了不同于Fleischer固溶强化理论。

设$\rho(F)$为施加于滑移位错上的力等于F的障碍密度。则作用于滑移位错上相应的切应力τ为：

$$\tau b=\int\rho(F)FdF$$

障碍对位错的作用力F必然与障碍离位错的距离y有关，所以$\rho(F)$可以变换为$\rho(y)$，因此：

$$\tau b=\int\rho(y)F(y)d(y)$$

在简化的情况下，$\rho(y)$可以推导出来。设位错D被位于原点的障碍物A所阻，但在其他障碍的平均作用下从位置(1)移到(2)（见图6-15）。在x很大处，位错的位移量设为dl，则$x=x$处，位错的位移量$dy(x)$为：

$$dy(x)=dl-G(x)dF$$

式中，$G(x)$为在障碍物前位错线形状改变的响应函数。它满足以下微分方程：

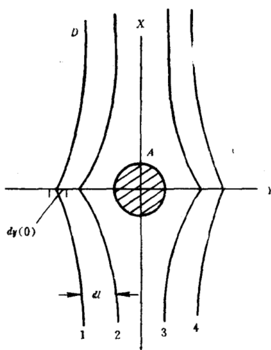


图6-15 Labusch模式

$$T\frac{d^2G}{dx^2}-\alpha G(x)+\delta(x)=0 \qquad (6\text{-}49)$$

式中，$\alpha=\int\rho(y)dF$，$\delta(x)$为Delta函数。求解(6-49)式得出

$$G(x)=\frac{1}{2(\alpha T)^{1/2}}\exp\{(-\alpha/T)^{1/2}|x|\}$$

假定位错原来是统计分布的，即$\rho_0=c/a^2$。位错受阻于位于y轴上的障碍A后，分布变得不均匀了，在稳定状态下位错密度$\rho(y)$等于：

$$\rho(y)=\rho_0\frac{dl}{dy(0)}=\frac{c}{a^2}\left(1+G(0)\frac{dF}{dy}\right) \qquad (6\text{-}50)$$

将(6-50)式代入(6-48)式得出

$$\tau_c b = \frac{c}{a^2}\int\left(1+G(0)\ \frac{dF}{dy}\right)F(y)dy$$

$$= \frac{c}{a^2}\left[\int F(y)dy + \int G(0)F(y)dF\ \right] \qquad (6\text{-}51)$$

忽略 (6-51) 的第一项 (可以忽略的条件以后讨论), 并将$G(0)=1/2(\alpha T)^{\frac{1}{2}}$代入，积分后求得：

$$\tau_c b = \frac{c}{a^2} F_m^2/4(\alpha T)^{1/2} \qquad (6\text{-}52)$$

从$\alpha=\int\rho(y)dF$，得出：

$$\alpha = \int\rho(y)dF = \frac{c}{a^2}\int\left[1+\frac{dF/dy}{2(\alpha T)^{1/2}}\right]dF \qquad (6\text{-}53)$$

忽略(6-53)中第一项以后得到

$$\alpha^{3/2} = \frac{c}{a^2}\ \frac{1}{2T^{1/2}}\int_0^{F_m}\frac{dF}{dy}dF$$

$$= \frac{c}{a^2}\ \frac{IF_m^2}{z(2T^{1/2})} \qquad (6\text{-}54)$$

式中，$I=\int_0^1\frac{d(F/F_m)}{d(y/z)}d(F/F_m)$。将(6-54)式代入 (6-52) 式，得：

$$\tau_c b = (c^{2/3}F_m^{3/4}z^{1/3})/2a^{4/3}T^{1/3}(4I)^{1/3} \qquad (6\text{-}55)$$

Labusch理论的优点是可以同时计算各种障碍的叠加作用，例如有二种合金元素固溶，其浓度分别为C_1和 C_2(at%)，则总的强化作用：

$$\tau_c b = \frac{z^{1/3}}{2a^{4/3}T^{1/3}\cdot(4I)^{1/3}}[c_1F_m^2(1) + c_2F_m^2(2)]^{2/3}$$

3．固溶原子与位错互作用F_m的估计。不管Fleisher或Labusch理论都把溶质原子作为位垒，所以固溶强化作用的强弱与固溶原子对位错的最大作用力F_m有关。一般说来溶质原子与基体在大小上、弹性性质上以及电子组态上都有差别，故溶质原子对位错有作用。

（1）原子尺寸差异起引的F_m^s。设溶质原子与基体原子因尺寸上差别引起的体积变化为δV，根据第五章的讨论得出溶质原子与位错互作用能U_1为：

$$U_1 = \frac{Gb}{\pi}\frac{1+v}{1-v}\delta V\frac{\sin\theta}{r}$$

令x为刃位错线方向，其布氏矢量b沿z轴。则溶质原子对位错在滑移面(xoz)上移动的阻力F_z^s为：

$$F_z^s = -\frac{Gb^2}{\pi}\frac{1+v}{1-v}\delta V\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{y}{y^2+z^2}\right)$$

$$= \frac{Gb^2}{\pi}\frac{1+v}{1-v}\delta V\varphi(y/z)/z^2 \qquad (6\text{-}56)$$

式中，$\varphi(y/z) = [2y/z]/[1+(y/z)^2]^2$

令$\frac{\partial}{\partial y}F_z = 0$　求得$y = z/\sqrt{3}$时　F_z^s极大，所以

$$(F_z^s)_m = \frac{3\sqrt{3}}{8\pi}Gb^2\frac{1+v}{1-v}\frac{\delta V}{z^2}$$

$$= \frac{3\sqrt{3}}{8\pi}Gb^2\frac{1+v}{1-v}\frac{\omega\Delta}{z^2}$$

因为$\delta V = \omega\Delta$。ω为基体原子体积，$\Delta = \frac{d\ln a}{dc}$（溶质原子固溶引起

晶格常数 a 改变）。

（2）弹性模量差别引起的F_m^e。如果溶质与基体在弹性模量上有差别，处于位错应力场中的溶质原子将由于感生偶极矩Ω而与位错有相互作用。互作用能U_2近似为：

$$U_2 = Gb^2\Omega\eta/8\pi^2(1-\nu)^2\gamma^2$$

式中，$\eta = \frac{d\ln G}{dc}$。作用在位错上的力F_z^e为：

$$F_z^e = \frac{Gb^2\Omega\eta}{8\pi^2(1-\nu)^2}\ \frac{\partial}{\partial z}\ \frac{1}{r^2}$$

$$= \frac{Gb^2\Omega\eta}{8\pi^2(1-\nu)^2 z^3}\varphi'\left(\frac{y}{z}\right)$$

式中，$\varphi'(z) = 2/[(y/z)^2+1]^2$，令$\frac{\partial}{\partial y}F_z^e = 0$求得：

$$(F_z^e)_m = \frac{Gb^2\Omega\eta}{8\pi^2(1-\nu)^2 z^3} \tag{6-57}$$

对一般固溶体来说η比Δ大20倍，将有关值代入(6-56)式和(6-57)式中可以得出F_m^s在数值上与F_m^e相当。说明原子大小差别引起的强化作用与弹性模量差别的强化作用同等重要。

4．Labusch理论适用条件的讨论。(6-56)式的成立是假定(6-51)式中第一项可以忽略为前题的，即要求：

$$\int_0^{F_m} G(0)FdF > \int_0^{F_m} F(y)dy \tag{6-58}$$

今以原子大小差别引起的F为例讨论上述问题。将(6-56)式代入，并注意到 $F=F_m$时 $y=\frac{z}{\sqrt{3}}$，而$F=0$时，$y=0$。求得：

$$\int_0^{F_m} F(y)d_y = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}}F_m z\int_0^{1/\sqrt{3}}\frac{d(y/z)^2}{[1+(y/z)^2]^2}$$

$$= \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}F_m z$$

另外 将 $G(0)=1/2(aT)^{\frac{1}{2}}$代入求得

$$\int_0^{F_m} G(0)FdF=\left[\frac{a^2F_m^4z}{cT(4I)}\right]^{1/3}\Big/2$$

要求(6-58)式成立，即要求

$$\frac{1}{8}\frac{a^2F_m^4z}{cT(4I)}>\left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}F_mz\right)^3$$

整理后，得出

$$\frac{a^2F_m}{cTz^2}>\left(\frac{4}{\sqrt{3}}\right)^3(4I)\simeq 50I$$

当固溶体较稀即 c 很小，而且阻力 F_m 并不太弱的情况下，上述不等式可以满足，就是说(6-51)式的第一项可以忽略。

5. 实验结果举例。Haasen 等研究了 Al、Ge、Cd、Zn 等元素对 Au基合金的影响。图6-16为实验结果。表明合金的屈服应力 τ_p 与浓度c的关系可以用 $c^{\frac{1}{2}}$(Fleische理论) 或$c^{\frac{2}{3}}$(Labusch理论)关系描述。但若把纯 Au 的屈服应力值也包括进去，则实验结果以$c^{\frac{2}{3}}$ 更恰当些。图 6-17 为Kratochvil等对Cu所作的实验，又一次表明τ_p与 $c^{\frac{2}{3}}$ 成正比。

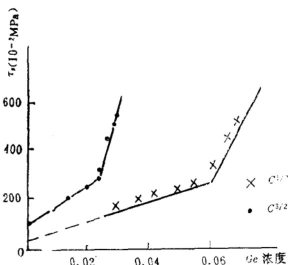


图6-16 Au-Ge固溶体屈服强度与浓度关系

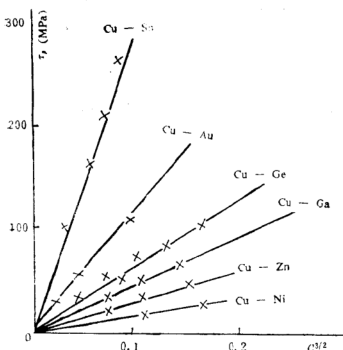


图6-17 铜合金的屈服强度规律

Friedrich等研究了Cu-Si-Ge 三元合金的τ_p与浓度关系。实验结果正如Labusch理论所要求的那样：

$$\tau_p^{3/2}=\tau_{cu}^{3/2}+\Delta\tau_{Ge}^{3/2}+\Delta\tau_{si}^{3/2}$$

式中，τ_{Cu}为纯Cu的屈服应力，$\Delta\tau_{Ge}$和$\Delta\tau_{Si}$是合金元素Ge和Si固溶后引起的应力增量。对Pb基合金和Mg基合金所作的实验也表明用Labusch理论描述实验规律比较合适。

二、体心立方晶体固溶强化

体心立方晶体的行为与面心立方晶体的有很多不同。研究得出决定体心立方晶体变形的是[111]螺位错运动。能量极小原理要求[111]螺位错躺在能谷中，在热起伏或应力作用下在位错线

上可能出现一些小的凸起，称为双扭折（见图6-18）。双扭折向两边扩展，位错线越过能峰进入另一能谷，这样晶体沿［111］方向形变了一个单位。所以晶体变形速率决定于双扭折形成速率或扭折横向扩展速度。讨论固溶原子的强化作用要区分二种情况，(1) 固溶原子影响双扭折形成和(2) 固溶原子影响双扭折扩展。为了了解固溶强化作用，首先要探讨[111]螺位错周围原子的分布以及位错移动时原子分布的改变。

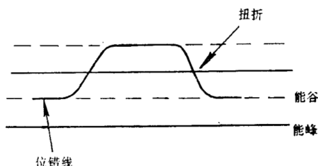


图6-18　带双扭折的螺型位错

(1) [111]螺位错周围的原子分布如图6-19所示。当位错从原在的点（以X表示）移到以△表示的相邻点，位错芯近邻原子由以1、2、3、4、5、6标记的六个换了以4、5、6、7、8、9标记的六个。螺位错每移动一步变换了三个近邻原子。现在来估计位错芯周围固溶原子数目。

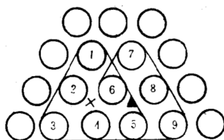


图6-19　[111]螺位错芯周围原子分布

设进入位错芯的原子数为N，Poisson分布给出N个原子中H个是溶质原子的几率：

$$W(H)=\frac{n^k}{H!}e^{-n} \tag{6-59}$$

式中，$n=Nc$（溶质原子数目）。当位错移动距离z，根据上述讨论可知有$3z/b$个原子进入位错芯，同时有$3z/b$个原子离开位错芯。所以$n=3cz/b$。设进入位错芯的$N=3z/b$个原子中有K个是溶质原子，离开位错芯的N个原子中有$H-m$个溶质原子，这样位错芯周围增加了m个原子。增加的几率为：

$$\mathrm{W}(m,\ n)=\sum \mathrm{W}(H)\mathrm{W}(H-m)$$

$$=\sum_{H=m}^{n} e^{-2n}\frac{n^{H}\cdot n^{H-m}}{H!(H-m)!}=I_m(2n)e^{-2n}$$

当$1<m<n$时$I_m(2n)$近似等于：

$$I_m(2n)\simeq\frac{e^{2n}}{2(\pi n)^{1/2}}\exp\left(-\frac{m^2}{4n}\right)$$

因此：

$$\mathrm{W}(m,\ n)\simeq\frac{1}{2(\pi n)^{1/2}}\exp\left(-\frac{m^2}{4n}\right) \tag{6-60}$$

令$m^2/2n=K^2$，则$W(m,n)dm=W(K)dK$，其中，

$$W(K)=\frac{1}{2\pi^{1/2}}\exp\left(-\frac{K^2}{2}\right) \tag{6-61}$$

（2）有一类固溶原子是通过影响双扭折的形成而起强化作用的，这类固溶原子在低温下呈现固溶软化作用。设Λ_d为双扭折段的长度，它是在长为$2D$的位错段上形成的。（见图6-20）。双扭

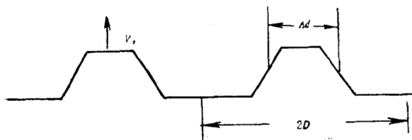


图6-20　螺位错上双扭折的形成

折的向前移动是从一个位谷到另一个位谷，移动的是一个原子大小的距离。移动引起的固溶原子变动的数目 $n=3\Lambda_d c/b$。引起固溶原子增加 m 个的几率 W_d，根据(6-60)式为：

$$W_d(m,\ n)=\left(\frac{b}{3\pi\Lambda_d c}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{m^2 b}{12\Lambda_d c}\right)$$

扭折形成的速率为：

$$p_d=\frac{2Dv}{\Lambda_d}\int W_d\exp\left(\frac{-U_d(\tau^*)+\frac{1}{2}mE}{kT}\right)dm \qquad (6\text{-}62)$$

式中，$U_d(\tau^*)$是有效切应力τ^*作用下扭折形成的激活能。E为一个溶质原子进入位错芯后引起能量增值，$\frac{1}{2}$是考虑平均的结果。

设v_s为螺位错运动平均速度，它由扭折形成和横向扩展的速率决定。现在讨论的是溶质原子通过阻碍扭折形成的固溶强化作用，因此位错运动的速度决定于位错向前移动一个原子间距 a 所需的时间 t，而 t 反比于扭折形成速率 P_d，所以$v_s\simeq a/t=aP_d$。已知晶体的形变速率$\dot{\varepsilon}=n_s v_s b$。其中$n_s$为可动位错数目，TaKeuchi作过估计：

$$n_s=(5\pi kt/Gbv^*)^2 \qquad (6\text{-}63)$$

所以，

$$\dot{\varepsilon}=n_s b(ap_d)$$

$$=\frac{2Dvab}{\Lambda_d}\left(\frac{5\pi kT}{GbV^*}\right)^2\int W_d\exp\left(-\frac{U_d(\tau^*)+\frac{1}{2}mE}{kT}\right)dm \qquad (6\text{-}64)$$

如果$U_d(\tau^*)$函数已知，求解上式就可以求出屈服应力与固溶浓度的关系，因为W_d中含有c的参量。Conte根据Fe晶须在120K以下温度的力学行为总结出低温的$U_d(\tau^*)$为

$$U_d(\tau^*) = U_0\left(1 - \frac{\tau}{\tau_p}\right)^2$$

式中，τ_p为晶体的派纳力。从(6-64)式得出OK时：

$$U_0\left(1 - \frac{\tau}{\tau_p}\right)^2 + \frac{1}{2}mE = 0$$

$$\tau = \tau_p\left(1 - \frac{1}{2}mE/U_0\right) \tag{6-65}$$

(6-65)式表明固溶原子数m增加，屈服应力降低，解释了体心立方晶体中固溶软化现象。

（3）另一类固溶原子通过影响双扭折横向扩展而起强化作用的。这类固溶元素不会引起合金的固溶软化。设Λ_K为扭折的宽度。扭折在应力τ作用下从x_1移动x_2。（见图6-21）。根据$m^2 = 2nK^2$的定义，求得溶质原子变化为：

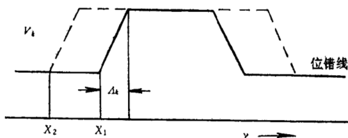


图6-21　扭折横向扩展

$$\bar{m}(x_1x_2) = K_2\int_{-\Lambda k/2}^{\Lambda k/2}|2n(x_1+\xi)|^{1/2}d\xi/\Lambda_K$$

$$+ K_1\int_{-\Lambda k/2}^{\Lambda k/2}|2n(x_2+\xi)|^{1/2}d\xi/\Lambda_K$$

相应的能量变化为：

$$U = \bar{m}(x_1x_2)E - \tau ab(x_2 - x_1)$$

因为x_1是扭折的平衡位置，而x_2是位垒的鞍点，因而

$$\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{x=x_1}=\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{x=x_2}=0$$

在$K_1=K_2$，且$K_1^2+K_2^2=K^2$的假定下，求得：

$$U(K,\ \tau)=\frac{3K^2E^2c}{2\tau ab^2}-\frac{\tau^3a^3b^4\Lambda_K^2}{18K^2E^2c} \tag{6-66}$$

$$x_2-x_1=\frac{3K^2E^2c}{2\tau^2a^2b^2}+\frac{\tau^2a^2b^3\Lambda_K^2}{6K^2E^2e}$$

双扭折横向扩展速度$\bar{v}_K$为：

$$\bar{v}_k=\nu\int_0^{K_m}W(k)2(x_2-x_1)dk/$$

$$\int_0^{K_m}W(k)\exp[U(k\tau)/kT]dk \tag{6-67}$$

式中，ν为扭折振动频率，$W(K)$为(6-61)式所表达的。因为讨论的是扭折扩展速率决定晶体变形速度问题，所以位错运动速度v_s

为：
$$v_s=\frac{a}{t}=a\bigg/\frac{D}{\bar{v}_K}$$

式中，$2D$为扭折与扭折之间距离。求得晶体形变速度$\dot{\varepsilon}$为：

$$\dot{\varepsilon}=n_sv_sb=\left(\frac{5\pi kT}{GbV^*}\right)^2\frac{ab}{D}\bar{v}_K$$

扭折扩展的平均速度$\bar{v}_K$[见(6-67)式]可以用克服最高位垒$U(K_m\tau)$耗费的时间内平均扩展L距离去近似，这样：

$$\dot{\varepsilon}=\frac{\nu abL}{D}\left(\frac{5\pi kT}{GbV^*}\right)^2\exp\left(-U(K_m\tau)/kT\right]$$

$$=\frac{\nu abL}{D}\left(\frac{5\pi kT}{GbV^*}\right)^2\exp\left(-\frac{3K_m^2E^2c}{2\tau ab^2kT}\right) \tag{6-68}$$

求解(6-68)式得出：

$$\tau=\frac{3K_m^2E^2c}{2ab^2KT}[\ln\dot{\varepsilon}-\ln A] \quad (6\text{-}69)$$

式 中，$A=\frac{\nu abL}{D}\left(\frac{5\pi kT}{Gbv^*}\right)^2$。

(6-69)式表明屈服应力τ与c成正比。但低温下，τ与c的关系不同于高温，为了简单起见讨论OK情况。这时(6-67)式有效的条件是$U(\tau)=0$，从(6-61)式求出：

$$\tau=27^{1/4}KEc^{1/2}/ab^{3/2}A_k{}^{1/2}$$

通过上述讨论得出体心立方晶体的固溶强化规律除与温度有关外还与固溶原子对螺位错运动的影响规律有关。很好地解释了固溶软化现象。

三、不均匀固溶强化

上述讨论是基于溶质原子均匀分布的假定。事实上根据溶质原子和位错的相互作用，以及溶质原子之间、基体原子之间互作用的弱强不同，在位错附近可以出现溶质原子偏聚而形成Cottrell气团、Snoek气团或Suzuku气团，也可以在固溶体中形成同类原子偏聚区域或合金的短程有序区。这些都会强化固溶体的。

1. Cottrell气团的强化作用。位错缺陷与间隙原子的相互作用导致位错线附近有间隙原子聚集，聚集的原子团将阻碍位错运动。按照间隙原子引起的畸变不同，形成的聚集原子团称为Cottrell或Snoek气团。今以Cottrell气团为例讨论强化作用。

Cottrell 气团是球形畸变的间隙溶质原子与刃型位错相互作用形成的，其互作用能为

$$U=\left(\frac{4}{3}\right)\frac{1+\nu}{1-\nu}Gb\epsilon R^3\frac{\sin\phi}{r}$$

稳定时要求U为负值，间隙原子将聚集于正刃型位错线的下方，因为间隙原子始终使$\epsilon>0$。现在估计可以间隙多少个间隙原子（例如碳原子）。刃位错的体膨胀率$\delta=-\frac{b}{2\pi}\frac{1-2\nu}{1-\nu}\frac{\sin\theta}{r}$，由此可以求出滑移面下半部单位原子长的位错周围的体膨胀为：

$$2R\int_{r_0}^{r}\int_{\pi}^{2\pi}-\frac{b}{2\pi}\frac{1-2\nu}{1-\nu}\frac{\sin\theta}{r}(rdrd\theta)$$

$$=-\frac{Rb(1-2\nu)}{\pi(1-\nu)}(r-r_0) \qquad (6\text{-}70)$$

设一个碳原子间隙引起的体积增加为ΔV，如果有n个原子间隙引起的体积变化$n\Delta V$正好等于位错滑移面下方离位错芯10Å的半径范围内膨胀的体积。于是：

$$n\Delta V=[Rb(1-2\nu)/\pi(1-\nu)](10-2) \qquad (7\text{-}71)$$

实验测知$\Delta V\simeq0.78\times10^{-23}$cm，$R$为原子半径$\simeq2.5\times10^{-8}$cm，布氏矢量$b\simeq2.5\times10^{-8}$cm，$\nu\simeq\frac{1}{3}$。将这些数值代入(6-70)式求出$n\simeq1$。表明单位原子长度的位错线下方10Å范围内能间隙1个碳原子。所以可用带黑的线代表被碳子钉扎的位错线。在外力τ的作用下，AE位错的BCD段脱离气团弓出形成$BC'D$段。（见图6-22）。设BCD段位错的线张力为τ，而$BC'D$段的线张力为τ_0。$BC'D$位错段的形成能W为：

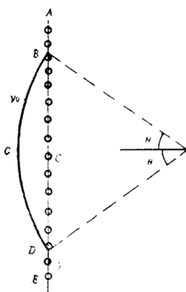


图6-22　位错脱离Cottrell气团

$$W=(2r\theta)r_0-(2r\sin\theta)\gamma-\tau b(\theta\gamma^2-\gamma^2\sin\theta\cos\theta)$$
(6-72)

式中，最后一项是外力τ作功。形成稳定的$BC'D$段的临界条件为$\frac{\partial W}{\partial\theta}=0$，由此求出

$$\cos\theta=\frac{\gamma}{\gamma_0}$$

将cos值代回(6-72)式并注意到$\tau br=\gamma_0$，求得：

$$W=\frac{\gamma_0^2}{\tau b}f\left(\frac{\gamma}{\gamma_0}\right) \tag{6-73}$$

若$\gamma\simeq\gamma_0$则$f(\frac{\gamma}{\gamma_0})\simeq\frac{1}{2}[2(1-\frac{\gamma}{\gamma_0})]^{\frac{3}{2}}$。位错段$BCD$脱离气团的速率$\dot{n}$为：

$$\dot{n}=C\exp(-W/kT)$$

假使要使变形达到屈服形变需要n_1个位错段BCD脱离气团，这样所需时间Δt为：

$$\Delta t=(n_1/c)\exp(W/kT) \tag{7-74}$$

若将屈服应力σ_y视为经一定时间后形变所需应力，即$\Delta t=m$（恒量）的应力。求得σ_y为：

$$\sigma_y=\gamma_0^2\left(\ln\frac{n_2}{cm}\right)\frac{f\left(\frac{\gamma}{\gamma_0}\right)}{bkT}$$

$$=\frac{\sqrt{2}\ln\frac{n_1}{cm}}{bkT}\gamma_0^{1/2}(\gamma_0-\gamma)^{1/2} \tag{7-75}$$

因$\gamma_0>\gamma$，所以位错受气团钉扎后，σ_y值增加，晶体固溶强化。从(7-75)式还得出σ_y与温度T成反比。温度增高，位错脱离气团容易，故固溶强化不明显。

温度较高（熔点温度的15～60％）即所谓中温范围，溶质原子有足够的扩散速度，这时气团的强化作用表现为位错拖着气团一起运动。设溶质原子形成的气团直径为 l ，则每一个溶质原子对位错的平均阻力f为$4A/l^2$。溶质气团对位错阻力σ_c为：

$$b\sigma_c = \left(\frac{\pi}{4}l^2\right)NC\left(\frac{4A}{l^2}\right) = \pi CNA \qquad (6\text{-}76)$$

式中，N为单位晶体中的原子数，C为溶质原子浓度，A为溶质原子与位错互作用常数(见5-10式)(6-76)式成立的条件是位错运动的速度v_s与溶质扩散速度v_c相当，v_c和v_s分别为：

$$V_C = Df/kT \qquad V_s = \dot{\varepsilon}/\rho_m b$$

式中，D为溶质原子扩散系数，f为作用于溶质原子的外加力，$\dot{\varepsilon}$为形变速率，ρ_m为可动位错密度。根据上述模式就可以理解含有间隙杂质的体心立方金属在中温范围内流变应力的温度曲线上出现峰值。图6-23为Cottrell气团的移动速度v_c随温度的变化。当试样在不同温度而恒定速度$\dot{\varepsilon}$下变形，如果忽略ρ_m的变化则位错运动温度v_s可近似地看作不变如图中虚线表示。在$T>T_c$时，$v_c>v_s$，气团移动的速度快于位错运动速度而且温度愈高，

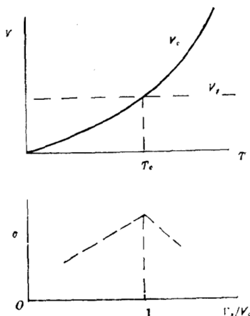


图6-23　气团效应示意图

差得愈多，因此气团对位错运动的阻力随温度增加不断下降。在$T<T_c$时，$v_c<v_s$，气团移动追不上位错运动，所以阻力较小，但温度增加，气团移动速度逐渐接近位错运动速度，阻力逐渐增大，当$v_c=v_s$时，阻力最大，解释了图 6-25中 $\sigma-\frac{v_s}{v_c}$ 曲线的结果。

图6-24为碳钢在室温－250℃范围内的拉伸曲线，曲线 a 是

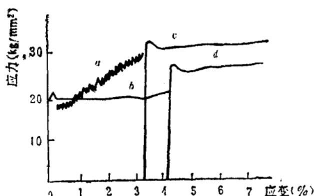


图6-24　碳钢拉伸曲线（室温-250°C）

（a）200℃形变　（b）250℃形变　（c）曲线a卸载后25℃形变

200℃的形变曲线，曲线上出现锯齿状变化，实际上是一种动态的应变时效过程，锯齿的出现是由于位错脱离气团随后气团又在位错上形成的交替过程引起的。曲线 b 是25℃拉伸结果。值得注意的是曲线 a 的加工硬化系数比曲线 c 的要大。再一次说明了在T_c温度以下，温度升高，气团的强化作用增加。

2．短程有序的强化作用。对于A和B两种组元组成的二元合金，如以W_{AB}、W_{AA}和W_{BB}分别表示A-B、A-A和B-B原子对的键能，则从$W=W_{AB}-\frac{1}{2}(W_{AA}+W_{BB})<0$可以断定合金中存在短程有序区。位错在滑移面上移动，当切过短程有序区就改变近邻原子对配列情况，使一些A-B对转变为A-A和B-B对（或者倒过

来），从而使键能增加。如果位错扫过单位面积增加的键能为Ψ，则为使位错运动需增加的切应力$\Delta\tau$为$\Delta\tau bls=\Psi ls$。其中ls为短程有序区与滑移面相交的面积。现在要求Ψ与固溶浓度c的关系。

设N为单位体积的晶体中总原子数，$\frac{1}{2}Nz$为近邻键总数。位错扫过短程有序区后，单位面积滑移面上重排的近邻数为m，并假定重排的结果是晶体从平衡组态转变为完全无序态。平衡态和完全无序态的A-B对的总数分别为$P^*_{AB}z$和$P^0_{AB}z$，则Ψ为：

$$\Psi=(P^*_{AB}-P^0_{AB})zmW/\frac{1}{2}Nz$$

从二元合金的有序理论求得：

$$P^0_{AB}=Nc(1-c)$$

$$P^*_{AB}=2Nc(1-c)/(\beta+1)$$

式中，$\beta=\{1+4c(1-c)[\exp(2W/kT)-1]\}^{\frac{1}{2}}$

当$2W/kT\ll1$，$\beta\simeq[1+2c(1-c)(2W/kT)]$

$$\therefore\quad P^*_{AB}=Nc(1-c)[1+c(1-c)](2W/kT)$$

$$P^*_{AB}-P^0_{AB}=(2W/kT)[Nc^2(1-c)^2]$$

$$\Psi=4c^2(1-c)^2(mW^2/kT)\tag{6-77}$$

m可以根据晶体学关系求出，例如面心立方晶体(111)面上原子密度为$\frac{2}{\sqrt{3}}b^2$，每个原子的近邻键中有三个是跨越滑移面的，当滑移b后其中二个发生重排，因而$m=\frac{4}{\sqrt{3}}b^2$。代入(6-77)式求出短程有序的强化作用，

$$\Delta\tau=\phi/b=\frac{16}{\sqrt{3}}\frac{bW^2c^2(1-c)^2}{kT}\tag{6-78}$$

§7 合金中第二相强化

实际使用的高强度合金大多含有第二相。其中强化作用最大的是高度弥散分布在基体中的金属化合物或氧化物粒子。基体中掺入第二相粒子的方法有许多种，最常用的是固溶体的脱溶沉淀和直接加入细小而硬的质点。前者称为沉淀（时效）强化，后者称为弥散强化。合金中第二相的含量一般在体积分数10%以下。根据第二相粒子的大小、分布和与基体强度比的不同可分为两类：硬的不变形的和软的可变形的第二相。这两类粒子的强化机制是不同的。

一、硬的不变形的第二相粒子强化

如果第二相的强度比基体高，位错运动不能使粒子变形，该类第二相的强化作用可用Orowan机制讨论。设第二相粒子的半径为 r，其体积分数为 f，粒子在滑移面上的半径r'统计求得$r'=\sqrt{\frac{2}{3}}r$。从$n'l^2=1$和$n'(\pi r')^2=f$，可以求出滑移面上粒子平均间距$l=(2\pi r/3f)^{\frac{1}{2}}$。晶体中的位错在切应力作用下，沿滑移面向前运动，遇到第二相粒子遂以Orowan提出的机制绕过第二相粒子继续前进，并在粒子周围留下位错圈。（如图6-25）。第二相粒子引起的屈服应力增加$\Delta\tau$决定于位错绕过障碍的最小曲率半径$\frac{l}{2}$，即：

$$\Delta\tau=T/\frac{bl}{2}$$

这儿T为位错的线张力，如果用$T=\frac{Gb^2}{4\pi K}\ln\frac{l}{r_0}$（见(2-23)式），代入(6-79)式，并注意到粒子半径使粒子间的间距缩小，有效间

距$l_2' = l - 2r$。这样就得到：

$$\Delta\tau = \frac{Gb}{2\pi K(l-2r')}\ln\left(\frac{l-2r'}{r_0}\right) \qquad (6\text{-}79)$$

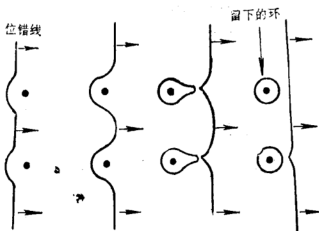


图6-25　Orowan强化机制

Ansell和Lenel从另一角度推求$\Delta\tau$。认为位错若按图6-27所示的机制绕过粒子，在粒子周围留下的位错圈对位错源有阻力，这样当位错圈的数目足够多时位错源将停止激发，估计得到只要有几十个位错圈在第二相周围堆积，位错源就停止放出位错。几十个位错跑出晶体不足以产生可觉察的宏观变形。因此Ansell等提出弥散的粒子在塞积位错圈的作用下可被切断的假设。粒子一旦被切断，塞积的位错圈随即消失，位错源在外应力作用下继续释放位错。所以第二相强化作用可从切断粒子所需的力去估计。

粒子半径为r的小球，其周围的n个位错圈对粒子的作用力为：

$$\tau_n = n\frac{\alpha Gb}{r} \qquad (6\text{-}80)$$

在这里粒子间距也就是塞积间距的$\frac{1}{2}$，即$L = \frac{1}{2}(l - 2r')$，代入

(5-18)式求得：

$$n=\frac{2\pi K}{4}\left[\frac{(l-2\gamma')\tau_s}{Gb}\right] \tag{6-81}$$

将(6-81)式代入(6-80)式中，求得

$$\tau_s=\frac{4}{2\pi K}\ \frac{\gamma'}{(l-2\gamma')}\tau_n$$

令τ_n为第二相断裂应力，即$\tau_n \simeq G^*/c$，其中G^*是第二相切变模量，c为常量约5～10。

令$\dfrac{4}{2\pi Kc}=\dfrac{1}{2c_0}$，则

$$\tau_s=\frac{G^*}{2c_0}\ \frac{\gamma'}{(l-2\gamma')} \tag{6-82}$$

对于球形的第二相粒子：

$$\frac{2\gamma'}{l}\simeq\frac{f}{0.82} \tag{6-83}$$

代入(6-81)式中求得：

$$\tau_s=\frac{G^*}{4c_0}\ \frac{(f)^{1/3}}{0.82-(f)^{1/3}} \tag{6-84}$$

二、软的可变形的第二相粒子强化

实验证实有的第二相粒子由于强度不够，位错可切过第二相粒子使其变形（见图6-28）。这种第二相粒子的强化作用来自切割第二相粒子消耗的功。位错切过第二相粒子比较复杂。下列各种效应对合金强化都有贡献。

1. 位错切割粒子形成表面台阶增加表面能，（见图6-26）。令 γ_s表示单位面积界面能，则位错切过后新界面形成消耗能量导

致晶体屈服强度增加$\Delta\tau$，由此可以导出：

$$\Delta\tau b l r = 2 r b \gamma_s$$

式中，r为粒子半径，l为粒子在滑移面上平均间距。如果位错切过的粒子是有序结构的粒子，则位错切过后除表面能增加外还有畴界能的增加$\pi r^2 \Psi_m$（Ψ_m为单位面积的畴界能）。对应的屈服应力增量$\Delta\tau$为：$\Delta\tau b l r = \pi r^2 \Psi_m$

图6-26 位错切割第二相粒子
（1）割前 （2）割后

所以如果粒子是有序的，则屈服应力增量$\Delta\tau$：

$$\Delta\tau = \frac{2\gamma_s}{l} + \frac{\pi \gamma \hat{\Psi}_m}{l b} \qquad (6\text{-}85)$$

2．Russell和Brown 对因第二相与基体的弹性模量差别引起的强化作过估计。设第二相粒子的弹性模量比基体的低，粒子在滑移面上的间距为l。位错切入第二相比较容易，但从第二相内移出需要耗费一定量的能量故导致合金强化，这可从图6-27所示的模型估计。

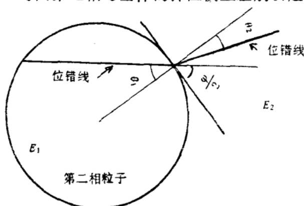


图6-27 第二相与基体弹性系数不同导致的强化

从(6-44)得出：

$$\Delta\tau \simeq \frac{Gb}{l} \sin\frac{\theta}{2} \qquad \theta = \theta_1 - \theta_2$$

E_1和E_2分别为第二相和基体的线张力。线张力平衡要求$E_1\sin\theta_1 = E_2\sin\theta_2$，当粒子从第二相移出时，$\theta_1 \simeq 90°$，所以

$$\Delta\tau_m = \frac{Gb}{l}\cos\theta_2 = \frac{Gb}{l}\sqrt{1-\left(\frac{E_1}{E_2}\right)^2} \qquad (6\text{-}86)$$

因为粒子有一定大小，E_1和E_2需适当修正。设E_1^∞和E_2^∞是无穷大粒子和无穷大基体中位错的线张力。这样

$$E_2 = E_2^\infty \ln\frac{A}{r_0}$$

$$E_1 = E_1^\infty \ln\frac{r}{r_0} + E_2^\infty \ln\frac{A}{r}$$

$$\therefore E_1/E_2 = 1 - \frac{(E_2^\infty - E_1^\infty)\ln r/r_0}{\ln(A/r_0)}$$

式中，r为粒子半径，A为基体晶粒大小。所以

$$\Delta\tau_m = \frac{Gb}{l}\left[1-\left(\frac{E_1}{E_2}\right)^2\right]^{1/2}$$

$$\frac{E_1}{E_2} = 1 - \frac{(E_2^\infty - E_1^\infty)\ln(r/r_0)}{\ln(A/r_0)}$$

3．当第二相粒子的层错能与基体不同（例如比基体低）时，位错进入第二相后位错变宽，位错离开第二相粒子时，位错重新束集，束集需要能量，因而使合金强化。

设γ_1和γ_2分别为粒子和基体的层错能。r为粒子半径。从图(6-28)得出位错移出粒子时，粒子对位错的作用力为：

$$F = (\gamma_2 - \gamma_1)rB(\gamma_1\gamma_2 r)$$

该式意指作用力F与层错能差值和粒子大小r之间有复杂的函数关系。Gerold和Hartman用最简单的模型估算了B函数。假定领先的不全位错是直的位错而且正好与粒子相切。（见图6-28)。求出

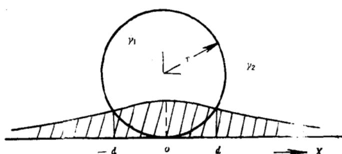


图6-28　第二相层错强化

$B = Ad/\gamma_2 r$其中$A = \gamma_1 \times$层错宽度，$2d$为扩展位错与粒子相切宽度（如图6-28所示）。由此求出

$$\Delta\tau lb = Ad(\gamma_2 - \gamma_1)/\gamma_2$$

因为$d^2 = r^2 - (r - \frac{A}{r_2})^2 \simeq 2rA/\gamma_2$

$$\therefore \Delta\tau = \sqrt{2}A^{3/2}r^{1/2}\left(\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2^{3/2}}\right)lb \qquad (6\text{-}87)$$

4．因为粒子体积与基体体积不同，所以不管第二相粒子如何形成，其周围必然存在应力场。应力场影响位错运动故而有强化作用。第二相粒子产生的应变场用错配球模型估计得出：

$$e_{rr} = -2\frac{\epsilon r^3}{R}, \quad e_{\phi\phi} = e_{\theta\theta} = \frac{\epsilon r^3}{R} \qquad e_{\theta\phi} = e_{\phi r} = e_{r\theta} = 0$$

式中r是粒子半径，ϵ是错配度，R为相距粒子的距离。关于粒子与位错的交互作用Mott等简单估计如下：

设单位晶体中有N个第二相粒子，粒子之间相距为l，则$Nl^3 = 1$，基体中某点到最近粒子的平均距离$R = \frac{l}{2}$，所以基体的平均切应变γ为：

$$\gamma = \epsilon r^3/R^3 = 8\epsilon r^3 N \simeq 2\epsilon f \quad （因 f = \frac{4}{3}\pi r^3 N）$$

对于柔软位错线来说，增加的流变应力$\Delta\tau$就等于内应力的算术平均值，因而粒子因体积与基体有差别导致的强化作用为：

$$\Delta\tau \simeq 2G\epsilon f \qquad (6\text{-}88)$$

5. 上述的四种强化效应一般说来同时存在于具体合金中，但何种为主要的，得视粒子的特征而定。例如含片状沉淀相的Al-Cu，Cu-Be合金中，界面强化作用可能是主导的。含γ'相(Ni_3Al)的Ni基合金中，由于错配度ϵ小，界面能低但γ'有序，有序强化可能起主导作用。含球状的且错配度ϵ较大的第二相的合金（如Co-Cu、Al-Zn合金），也许粒子引起的内应力是强化的主要因素。又如因为发现Fe-Cu合金（过时效态）的加工硬化现象不明显，Russell和Brown提出了弹性模量差别是强化的主要因素。第二相强化问题的复杂性还在于粒子形状很不规则而且大小不一，粒子的分布又往往是随机的，因此第二相强化理论目前只能做到预测强化效应的大小和变化趋势。实际强化效果有待实验测定。

§8　马氏体相变与马氏体强化

马氏体相变是一种没有扩散的点阵畸变式的组织转变。其相变的充要特征是(1)相变需要形核和过冷，(2)马氏体相与母相之间存在易动的界面，(3)相变时应变能很重要，从而说明马氏体为片状，转变前沿是一个不变平面界面。

能量分析推知马氏体相变的能垒高度为。

$$\Delta G = \frac{32\pi}{3}(A^2\sigma^2//\Delta g^*) \simeq 10^3 kT$$

式中，σ为界面能，Δg^*为马氏体与奥氏体之间自由能差。表明马氏体相变能很高，因此必须假定在相变前奥氏体中就有马氏体核存在。

一、马氏体形核的位错模型

许多学者提出各种模式：

(1) Yenables提出在马氏体相（α'相）形成前先形成ε马氏体，它是奥氏体中已存在的扩展位错逐层扩展形成的。奥氏体是面心立方结构，原子层以$ABCABC\cdots$方式堆积。设由于某种原因每隔一层原子层发生相对位移，形成如下所示排列：

第 0 层　$ABCABCABCABC\cdots$



第 1 层　$ABCACABCABCA\cdots$



第 3 层　$ABCACACABCAB\cdots$



第 5 层　$ABCACACACABC\cdots$

$m \longleftarrow\!\!\longrightarrow n$

这样m与n间原子层以六方结构排列构成ε马氏体核。以后ε马氏体经过适当切变成为α'马氏体。但有人指出奥氏体转变为ε马氏体与奥氏体转变为α'马氏体是两个独立过程。不是如上述的相继完成的过程（$r \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$）

(2) Zener提出另一机构。他认为奥氏体中$\frac{a}{2}[\bar{1}10]$全位错虽常以扩展位错形式存在，但为了形成马氏体核，$\frac{a}{2}[\bar{1}10]$不是按上述方式将原子位移$\frac{a}{6}[112]$，即从(2)位置移到(3)位置而是只移$\frac{1}{3}\vec{b}_1$到达图(6-29)所示的3′位置。这样原在(111)面的原子分布改变成图(6-29 b)所示，与体心立方(110)面上的原子分布相似，差别仅在边长和夹角不同。图6-29的四边形是等边的($=\frac{\sqrt{2}}{2}a_\alpha$)夹角60°，而(110)面的二边是不等的，分别为a_a和$\sqrt{2}a_\alpha$，夹角

90°。图6-29 的四边形要成为马氏体核，一边要从$\frac{\sqrt{2}}{2}a_a$拉长到$\sqrt{2}a_a$而另一边从$\frac{\sqrt{2}}{2}a_a$缩短到a_a。

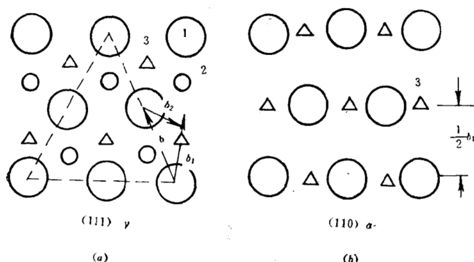


图6-29 $\gamma\to\alpha'$的Zener模型

（3）Bogers 和 Burges 提出的马氏体形核模型也是基于不全位错运动。若不全位错在（111）密排面每三层扩展，其堆积次序从$ABCABCABC\cdots$变化成$ABC\overset{m\leftarrow}{B}AC\overset{\rightarrow n}{B}ACABC\cdots$。在$m$与$n$的区域内形成孪晶。图 6-30 为原子堆积的侧视（A,B）和顶视（C，D）图。孪晶区的形成对应图6-30A和C图转变为B和D图。如果不全位错是在每隔三层滑排面上扩展，则最终态相当于孪晶变型，图B中的夹角$\theta=60°$的平行四边形改变为图D的夹角ω为70°的菱形。这时原子排列类同体心立方的(110)面。但需再切变一次即从图D变化到图E所示的原子排列才与体心立方（110）面上的原子排列完全相同。

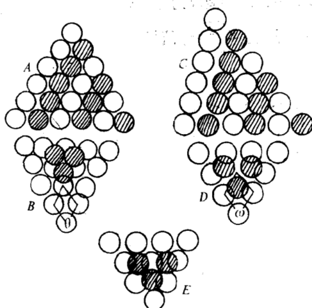


图6-30 $\alpha\to\alpha'$的B-B模型，图A、B为$(111)\alpha$的侧、顶视图。图C、D为孪晶形成后，$(111)\alpha$的侧、顶视图

二、马氏体胚核的长大

长大过程中什么样的位错在起作用，如何起作用？这方面的问题并没有解决。问题的复杂性在于不同钢种中马氏体形态各异，有板条状马氏体、片状马氏体、蝶状马氏体……。不同形态的马氏体其惯析面也不相同。板条状马氏体内含大量位错又称为位错马氏体，它与奥氏体的惯析面为$(111)_r$。这样的马氏体可以理解为胚核形成后留在胚核与奥氏体交界的$\frac{a}{2}[\bar{2}11]$不全位错在温度或应力作用下不断扩展的结果。因为$\frac{a}{2}[\bar{2}11]$位错在$(111)_r$面内运动，故惯析面为$(111)_r$。但这种模式无法说明中碳、高碳

或高镍钢中片状马氏体的形成。这种马氏体的特点是片的中间有孪晶中脊，故又称为透镜状孪晶马氏体，它的惯析面为$(225)_r$或$(259)_r$。这种马氏体的形成可以理解为，马氏体胚核按上述层错扩展方式形成，内含孪晶区，（表现为孪晶中脊），当胚核长大到一定大小时，由于马氏体与奥氏体的原子间距的相差，马氏体与奥氏体交界上将形成位错。Esbelby估计得出，设马氏体形成时的切变量为s，则因马氏体与奥氏体原子间距相差引起的切应力$\sigma = 2Gsa/c$。当$\sigma > \sigma_D$（形成位错的临界切应力，Kelley估计得出$\sigma_D \simeq 0.025G$）。交界上位错形成。切应力σ随a/c发展，（其中a和c是假定椭球形马氏体的长轴和短轴），所以当马氏体胚核发展到适当大小，使$\sigma > \sigma_D$条件得到满足，交界上就形成了新的位错，位错移动形成马氏体。

关于界面位错的类型，Frank作过估计。他从K-S关系，即$\{110\}\alpha' \parallel \{111\}_\gamma$，$[11\bar{1}]\alpha' \parallel [1\bar{1}0]\gamma$的关系出发计算表面因马氏体和奥氏体中原子间距的差别使$\{110\}\alpha'$的面间距与$\{111\}\alpha$的面间距差～1.6%（对Fe来说），$[1\bar{1}0]\alpha$方向的长度与$[111]\alpha'$的差1～2%。这样导致界面上错配位错形成。图6-31为按Knapp和Deblinger建议的K-D模型形成的位错环。这种环面与$(225)_r$平面垂直的位错环可以在$[1\bar{1}0]_r$和$[225]_r$方向扩展。

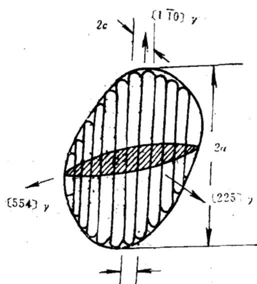


图6-31

三、马氏体强化

碳钢淬火形成碳过饱和的马氏体。马氏体的强度很高，但强化的原因学者间认识并不完全一致。马氏体强化效应可能有：(1) 阻碍滑移的面位垒（例如晶界、孪晶界）增多；(2) 过饱和固溶强化；(3) 淬火形成的马氏体中有许多位错；(4) 位错线上可能有第二相析出。Ansell对上述几种可能的强化作用作过估计。(1) 马氏体形成于奥氏体晶内，一个奥氏体晶粒内形成几个马氏体束（或片）。这种晶粒细化（界面增加）的效应可用Hall-Petch式：$\sigma_y=\sigma_{y_0}+Kd_a^{-\frac{1}{2}}$估计。式中的$d_a$是马氏体束（片）的线度，虽然$d_a$比原奥氏体晶粒线度$d_y$小，但由此引起的强度升高不足以说明马氏体强化效果。(2) 已知固溶强化作用可用$\Delta\tau\simeq|\eta+\alpha\Delta|c^{\frac{1}{2}}$估计。式中的△和$\eta$为$\frac{d\ln a}{dc}$及$\frac{d\ln G}{dc}$。虽然马氏体中碳含量超过饱和固溶度很多，但由此引起的强化效果也不能说明马氏体显著的强化作用。(3) 淬火以后马氏体中的位错明显增加，位错密度一般高到$10^{11}\sim10^{12}$与严重冷加工后金属中的位错密度同样量级。但冷加工强化不如马氏体强化。因此Ansell等认为位错线上第二粒子（碳化物）析出是马氏体强化的主要原因。为了支持上述观点，Ansell等做了某些实验。将M_s点为－35℃的Fe-Ni-C合金以不同速度迅速淬入液氮温度，而后于不同温度回火。实验发现；(1) 当回火温度高于室温后，试样硬度上片，表明淬火时形成的马氏体（称为新鲜马氏体）强度是不高的，室温附近回火，碳原子向位错扩散导致强度升高。且实验发现合金中c量愈高，回火引起的强化作用愈明显。(2) 淬火形成的新鲜马氏体强度与淬火速度很有关系，当淬火速度$Q_h<Q_{h_0}$（淬火临界速度），马氏体硬度明显上升，而且合金中碳量愈多，Q_{h_0}愈大。这又一次表明马氏体

强化与碳是否在位错周围聚集有关。除寻求实验支持外，Ansell还用位错理论作了定量估计。Cohen等发现Fe-Ni-C（$C<0.4wt\%$）合金的马氏体强度规律：

$$\rho=3.1\times10^2x_c^{0\cdot8}(PSi)$$

$$\simeq2.2+10^2X_c^{0\cdot3}(\text{MPa}) \qquad (6\text{-}89)$$

式中，X_c为原子浓度（重量%）。

假定淬火速度$Q_h<Q_{ho}$。碳原子有可能向位错扩散致使碳化物在位错附近析出。析出的体积分数f为：

$$f=\alpha\rho\left(\frac{\pi}{2}R^2\right)\frac{x_c}{x_a} \qquad (6\text{-}90)$$

式中，ρ是位错密度，R是碳化物粒子半径，α为比例常数，x_c和x_o分别为钢中碳量和饱和固溶的碳量。假定第二相是球形的，根据(6-84)式：

$$\Delta\sigma_y\simeq\frac{G}{4c_0}f^{1/3}/(0.82-f^{1/3}) \qquad (6\text{-}91)$$

$C_o=\frac{4}{2\pi kc}\doteq120$，当$f$不大时(6-91)式改为：

$$\Delta\sigma_y\simeq\frac{G}{98}f^{1/3}$$

$$\simeq\frac{G}{98}\left[\alpha\frac{\pi}{2}\rho R^2\left(\frac{x_c}{x_o}\right)\right]^{1/3} \qquad (6\text{-}92)$$

将有关值代入（设$G=6\times10^4\text{MPa}$，$\rho=10^{12}/\text{cm}^2$，$R\simeq\frac{100}{2}\text{Å}$）

得出：　$\Delta\sigma_y\simeq2.5\times10^2(x_c)^{1/3}$ MPa

它与Cohen的实验规律(6-89)式很接近，所以基于碳化物在位错

上的析出，模式可以解释马氏体强化问题。

§9 高温强度的位错理论

一、蠕变的描述

高温使用的材料在恒应力下除瞬时形变外还要发生缓慢而持续的形变称为蠕变。表征高温强度的量一般采用(1) 蠕变极限—确定温度下引起一定蠕变速度的应力。(2) 持久强度——确定温度下经过一定时间后材料断裂的应力。

材料在恒应力作用下的蠕变曲线一般可分为三个阶段：第Ⅰ阶段—蠕速渐减，第Ⅱ阶段—蠕速稳定不变和第Ⅲ阶段—蠕速加速直至断裂（见图6-32）低温和小应力条件小可能只有第Ⅰ阶段

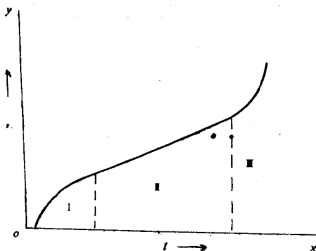


图6-32　蠕变曲线

存在，而高温或大应力条件下第Ⅰ阶段后紧接着出现蠕变第Ⅲ阶段。蠕变各阶段规律为：

$$\varepsilon_{I} = \varepsilon_{0} + \beta t^{1/3}$$

$$\varepsilon_{II} = \varepsilon_I + \chi t$$

$$\varepsilon_{III} = \varepsilon_{II} + \gamma t^n \quad (n > 1)$$

就材料蠕变性能来说重要的是第Ⅱ阶段蠕速，所以研究得最多。

二、蠕变第二阶段的位错理论

讨论问题的具体模型有多种，但实质都在于阐明被阻的位错如何在应力和温度作用下重新激活，就是说第Ⅱ阶段是位错运动被阻和受阻位错重新激活的动态平衡阶段。下面以Weetman 提出的塞积位错的攀移模式来讨论蠕变第Ⅱ阶段问题。

设材料经蠕变第Ⅰ阶段后位错塞积于蠕变过程中形成的Cottrell-Lomer 位错前（见图6-33）（塞积的障碍物也可以是多边化墙壁或第二相粒子等）。这时作用在位错上的合切应力等于零，但合正应力$\sigma_n \neq 0$，塞积群中的领头位错可能通过攀移而离开障碍物，随后位错源重新开动，形变继续。

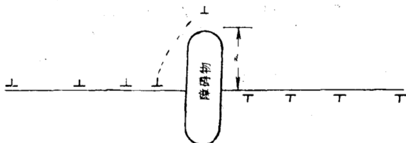


图6-33　稳定蠕变阶段的位错模式

位错攀移速率v_c为：

$$v_c = c_j v_j$$

式中，c_j是割阶浓度$c_j = c_j^0 \exp(-U_j/kT)$。$v_j$是割阶移动速率：$v_j = Db\dfrac{F_c - F_s}{kT}$（见2-51），$F_c$为促使位错攀移的力，它与正应力$\sigma_n$有关。合正应力$\sigma_n$与$n\tau$成正比（$n$为塞积群中位错数目，$\tau$为

外加切应力。将F_c与$n\tau$的关系代入，且假设$F_s \ll F_c$，所以

$$V_c = C_j^0 D_0 \frac{n\tau b^2}{kT} \exp\left[-\frac{U_0+U_j}{kT}\right]$$

式中，U_0为自扩散激活能。

设领先位错攀移距离d所需的时间为t_d，它应等于位错滑移了塞积列长度L的一半所需的时间t，所以位错滑移速度V等于

$$V = \frac{L}{2t} = \frac{L}{2} \frac{V_c}{d}$$

又知 $L \simeq G\frac{n}{\tau}$

晶体的形变速度$\dot{\varepsilon}$为：

$$\begin{aligned}
\dot{\varepsilon} &= \Omega\rho_m V b \\
&= \Omega\rho_m \frac{Gnb}{2\tau d}\left(C_j^0 D_0 \frac{n\tau b^2}{kT} \exp\left[-\frac{U_0+U_j}{kT}\right]\right. \\
&= \frac{\Omega\rho_m G C_j^0 D_0 b^3}{2dkT}\left[n^2 \exp\left(-\frac{U_0+U_j}{kT}\right)\right]
\end{aligned}$$

从(5-18)式可以假定$n^{\frac{1}{2}} = \alpha\tau$，所以

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \frac{\tau^4}{kT} \exp\left(-\frac{U_0+U_j}{kT}\right) \qquad (6\text{-}93)$$

(6-93)式符合高温，应力不太大情况下的实验规律：

$$\dot{\varepsilon} = \text{const}\sigma^m \exp(-U/kT)$$

m在4～5之间。

§10 疲劳强度的位错理论

由于许多材料在实际使用条件下承受交变负载的。交变负载

作用下材料的断裂应力(σ_{ff})要比通常的韧断应力(σ_{df})低许多。一般σ_{ff}大约为σ_{df}的($\frac{1}{2}$～$\frac{1}{4}$)。因此疲劳问题在工程上很重视。

可用s(交变负载的应力振幅)对N(断裂前经历的循环次数—疲劳寿命)的图来表征材料的疲劳行为(见6-34图)。材料按疲劳行为分为两类：一类材料例如碳钢有明显的疲劳极限。即存在着极限应力，当交变负载的应力振幅低于此值时，循环次数N即使到无限大也不会引起断裂(见图6-34曲线a)。另一类材料例如铝合金，没有明确疲动极限。这时常常以某一规定的循环数 (例如$N=10^8$)的断袋应力表征材料的疲劳特征。

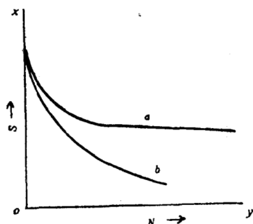


图6-34 疲劳的S-N曲线

一、疲劳现象的特点

1. 疲劳硬化状态表现出来的Baushinger应变比普通加工硬化状态的小。2. 疲劳硬化集中在疲劳的最初阶段，以后不再硬化，表明疲劳的硬化效应被反向加工的软化效应抵消。即硬化时形成的位错组态对反向负荷来说是不稳定的。3. 交变负荷作用下滑移集中在少数的滑移带中，形成持续的滑移带。即使将材料的表面层抛光后滑移带仍清楚可见。这些滑移带进一步发展就形成表面上的侵入沟与挤出带。侵入沟与挤出带在5—10%的疲劳寿命时就开始形成。4. 疲劳裂口一般发源于侵入沟处。发展到10^{-4}～10^{-3}厘米线度就停止下来。在以后的循环过程中基本不变。直

到快断时(90%疲劳寿命)裂口开始扩展导致材料疲劳断裂。

疲劳的位错理论要解释侵入沟和挤出带的形成，要解释裂口的形成和扩展。

二、疲劳的位错模型

有二种模式可以说明侵入沟和挤出带形成

1. Cottrell-Hull机制。晶内有二个位错源S_1和S_2。（见图6-35）。它们能在交叉的滑移面上开动。若S_1受到的分解切应力大于S_2受到的，S_1就先开动。当应力反向后S_2再开动。应力反正加载，S_1和S_2源交替开动。这样侵入沟和挤出带就逐渐形成。

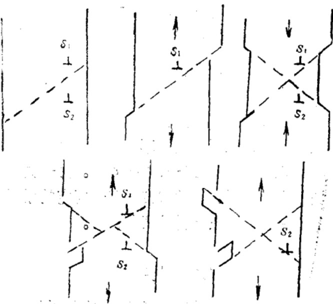


图6-35 Cottrell-Hull的疲劳位错机制

2. Mott 机制。这一机制可用图6-36来说明。设xx'为位错线，它的柏氏矢量在垂直表面P方向上有分量。当交变应力作用时，在前半循环中，沿滑移面$AA'BB'$滑到BB'角，由于应力集中等原因交滑移到$BB'CC'$面上。在后半循环中，位错沿$CC'DD'$滑移到$DD'AA'$面上，随后又交滑移到$AA'BB'$平面。如此循环一周，若xx'位错是纯螺型的，就在P平面上给出一高度为柏氏矢量大小的挤出。循环次数增加，挤出高度相应增加，形成了挤出带。与此相对应，在P平面的对面形成

了形状、大小相同的侵入沟。

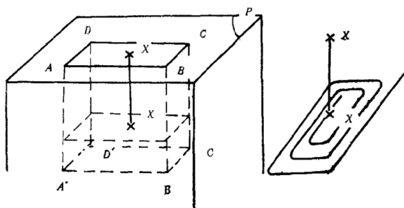


图6-36 Mott的疲劳位错机制

参 考 文 献

1. 冯 端等，1975. 金属物理 科学出版社 北京
2. 哈宽富. 1983金属力学性质的微观理论 科学出版社 北京
3. P. B. Hirsch, The relation between the structure and mechanical properties of metals 1963. 1. 40
4. A. Seeger, ibid 1963 1. 4.
5. F. R N Nabarro, edit. Dislocation in Solids Vol4. -5.
6. Kathryn C. Russell and L. M. Brown, Acta Met 1972. 20 969.
7. V. Gerold and K. Hartman, Proc. of the Intern. Conf. on Strength of Metal Alloys. Suppl. to Trans. Japan Inst. Metals 1986. 9 510.
8. M. Cohen, 材料科学与工程，1983. 2. 34.

9. H. Knapp and V. Dehlinger, Acta Met. 1956 4 289.

10. D. A. Porter and K. E. Eastering; Phase Fransformations in Metals and Alloys. 1981. VNB-Company. New-York.

习题与思考题

1. 导出形变量 ε 与位错密度ρ，位错移动平均距离S的关系，并讨论屈服变形($\varepsilon = 0.1\%$表示宏观屈服)时需多少个位错（数量级）跑出晶体。

2. 试用位错塞积强化模型推导出Hall-Petch公式：

$$\sigma = \sigma_0 + Kyd^{-\frac{1}{2}}$$

并估计40CrNiMoA钢经细化处理晶粒度为13级时的σ值)已知晶粒度为 3 级时 $\sigma = 1420\text{MNm}^{-2}$， 7 级时则为 1480MNm^{-2}［注 $d(mm) = 0.254/[2^{(N-1)/2}]$，$N$= 晶粒度级别。

3. 若已知某物质的杨氏模量$E = 2\times10^{11}\text{Nm}^{-2}$，表面能 $r = 8\text{Nm}^{-1}$，试计算在$7\times10^{7}\text{Nm}^{-2}$的拉伸应力下，这种物质中能够扩展的最小尖锐裂纹的长度。

4. 已知黄钢、奥氏体不锈钢、纯铝和纯镍的层错能r分别等于10、10、250和400mJm^{-2}，其切变模量G分别为2.9、8.34、2.35和$7.36\times10^{-10}\text{Nm}^{-2}$，其柏氏矢量$b$分别为2.55、2.58、2.8和$2.49\times10^{-10}\text{m}$。试估算这四种材料中扩展位错的近似宽度$d$并说明它们的加工硬化特性有何区别？（注可用$d\simeq\frac{Gb^2}{24\pi r}$估计）

第七章　晶体缺陷对物理性能的影响

缺陷的存在破坏了晶体结构的完整，对其性能有严重影响。为了对它有较好的了解，有必要对性能有关的物理基础略作回顾。

§1　电子论基础

一、量子力学基本方程

描述电子等微观粒子在晶体中的行为要用薛定格(Schordinger)方程

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\bar{H}\varphi \tag{7-1}$$

式中，$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$，$\bar{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})$为哈密顿能量算符。$U(\vec{r})$是电子受到的位函数，根据具体问题可以写出明确的表达式。求解（7-1）式就得到波函数ϕ，由此可以了解晶体的性能，因为$|\phi|^2$代表电子分布规律。

晶体中电子受到的位函数$U(\vec{r})$一般可以分为不含时间变量和显含时间变量二类；即$U(\vec{r})$和$U(\vec{r},t)$。前者称为稳定态问题。这时(7-1)式可以简化。

令　$\phi(\vec{r}\ t)=\Psi(\vec{r})f(t)$

代入(7-1)式，求得函数Ψ和f各自满足的方程式；

$$\left.\begin{aligned}&i\hbar\frac{df}{dt}=Ef\\&\bar{H}\phi=E\phi\end{aligned}\right\} \tag{7-2}$$

从(7-2)式容易求出$f(t)=f_0\exp(-iEt/\hbar)$，因此当位函数U不显含t时，只要求解称之谓稳定态薛定格方程$\bar{H}\Psi=E\Psi$即可。

二、晶体中电子的能带

晶体结构的特点是离子实周期排列。晶体中的电子受到周期性变化的位场作用，因为位函数不显含时间t，所以讨论问题只要求解稳定态薛定格方程：

$$\bar{H}\Psi=E\Psi \tag{7-3}$$

式中，$\bar{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})$，且$U(\vec{r})=U(\vec{r}+\vec{d})$，$\vec{d}$为$\vec{r}$方向的周期长度。业已证明描述完整晶体中电子行为的波函数Ψ为布洛赫函数；

$$\left.\begin{aligned}\Psi(\vec{r})&=u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\\u_k(\vec{r})&=u_k(\vec{r}+\vec{d})\end{aligned}\right\} \tag{7-4}$$

周期函数$u_k(\vec{r})$可以展开成福氏级数；

$$u_k(\vec{r})=\sum C_n\exp(2\pi i\vec{n}\cdot\vec{r})$$

式中，$\vec{n}=n_1\vec{b}_1+n_2\vec{b}_2+n_3\vec{b}_3$($b_1$、$b_2$、$b_3$为倒易晶格的平移矢量，$n_1$、$n_2$、$n_3$为晶面密勒指数。）且$|\vec{n}|=\frac{1}{d}$。将(7-4)式代入(7-3)式，当周期位$U(\vec{r})$不大的情况下，用准自由电子方法求得当$\bar{K}^2=(\bar{K}-2\pi\vec{n})^2$时，电子的能量曲线不连续即出现电子不允许存在的能量范围。称这种范围为禁带。电子允许存在的能量范围称为允许带。晶体中电子的能量分布是由允许带和禁带相间组成。按禁带宽窄可把晶体分为绝缘体、半导体和导体。

业已证明禁带宽度ΔE_n与晶体场$U(\vec{r})$有关：

$$\Delta E_n\cong2|U_n|=\frac{1}{a}\int_0^a U(\vec{r})\exp(2\pi i\vec{n}\cdot\vec{r})d\tau \tag{7-5}$$

缺陷所在区域的周围晶体，它的位函数受到干扰，位函数从U变为$U \pm \Delta U$。从(7-5)式得出缺陷的存在会使禁带的宽 度发生改变，从而对晶体的性能产生影响。

三、晶体中电子跃迁的规律

当晶体受到与时间有关的外场例如电场等的作用，晶体中的电子会由一种量子状态跃迁到另一种量子状态。当外场不很大的情况下可以用与时间有关的微扰近似方法计算电子跃迁的几率。

设$W(t)$为与时间有关的外场位函数，这时晶体中 电 子的薛定格方程为：

$$i\hbar\frac{\partial \phi}{\partial t} = [\overline{H}_0 + \overline{W}]\Phi \tag{7-6}$$

式中，$\overline{H}_0 = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)]$为电子未受外场作用的哈密顿算符。其对应的波函数$\Psi = \varphi f$，$f = f^0 \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$，且$\overline{H}_0\varphi = E\varphi$。在$W(t)$为微小项的假定下，可以将$\phi$对$\overline{H}_0$的本征函数系列 Ψ_n展开：

$$\phi = \sum a_n(t)\Psi_n(t) \tag{7-7}$$

现在的问题是求出展开系数a_n。将(7-7)式代入(7-6)式得到：

$$i\hbar\Sigma\Psi_n\frac{da_n}{dt} + i\hbar\sum a_n\frac{\partial \Psi_n}{\partial t}$$

$$= \Sigma a_n\overline{H}_0\Psi_n + \Sigma a_n\overline{W}\Psi_n \tag{7-8}$$

利 用$i\hbar\frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \overline{H}_0\Psi_n$则(7-8)式改为

$$i\hbar\Sigma\Psi_n\frac{da_n}{dt} = \Sigma a_n\overline{W}\Psi_n \tag{7-9}$$

以Ψ_m^*左乘(7-9)式两边，然后对空间积分，又注意到$\int\Psi_m^*\Psi_n d\tau=\delta_{mn}$则(7-9)式改为：

$$i\hbar\frac{da_m(t)}{dt}\ \Sigma a_n(t)W_{mn}e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t} \tag{7-10}$$

式中，$W_{mn}=\int\Psi_m^*\overline{W}(t)\Psi_n d\tau$，令$\omega_{mn}=(E_m-E_n)/\hbar$则(7-10)式改为：

$$i\hbar\frac{da_m(t)}{dt}=\Sigma a_n(t)W_{mn}e^{i\omega_{mn}t} \tag{7-11}$$

从(7-11)式严格求解$a_n(t)$是困难的，但注意到$W(t)$是微扰项，引入一个参量λ，以λW代替W，并将$a_n(t)$展开成λ的幂级数：

$$a_n=a_n^0+\lambda a_n^{(1)}+\lambda^2 a_n^{(2)}+\cdots \tag{7-12}$$

将(7-12)式代入(7-11)式，注意到$\lambda\leqslant 1$，令等式两边λ同幂的项分别相等，求得：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{da_n^0}{dt}=0\\&i\hbar\frac{da_n^{(1)}}{dt}=\Sigma W_{mn}a_m^0 e^{i\omega_{mn}t}\\&i\hbar\frac{da_n^{(l+1)}}{dt}=\Sigma W_{mn}a_m^{(l)}e^{i\varphi_{mn}t}\end{aligned}\right\} \tag{7-13}$$

从(7-13)式看到a_n^0与时间无关，它代表电子未受外场位函数$W(t)$作用的初始状态，因此可以假定$t=0$时电子状态为Ψ_k，这就要求$a_n^0=\delta_{nk}$。将有关值代回(7-13)式，求得：

$$a_n^{(1)}=\frac{1}{i\hbar}\int W_{kn}e^{i\omega_{kn}t}dt \tag{7-14}$$

因为$W(t)$为微小项，所以只要求出a_n的一级近似值$a_n^{(1)}$即可。

通过上述讨论悉知晶体中的电子在外场位函数 $W(t)$ 的作用下会从Ψ_k状态跃迁到Ψ_m状态，跃迁几率为$|a_n^{(1)}(t)|^2$。如果$W(t)$的具体表达式已知，就可以求出电子状态改变几率。

晶体的物理性能是晶体中电子分布及其变化规律的反映。缺陷破坏晶体周期场从而改变电子分布组态和组态跃迁规律。一般缺陷破坏晶体场的作用都可以看作微扰项。因此上述讨论得到的结果乃是以后研究缺陷对性能影响的基础。

§2 缺陷与晶体电学性能

一、晶体电阻

电阻就其物理意义来说是表征电子在运动过程中它所处的状态被改变的几率。实际上位于晶体阵点上的原子（或离子实）是不断地振动着的，它与电子相互作用使电子状态发生改变，因此金属晶体有电阻，而且温度愈高电阻愈大。

设位于晶格平衡位置上的离子实与电子的互作用位函数为$U(\vec{r})$，偏离平衡位置的离子实与电子的互作用位为$U(\vec{r}')$，则位函数的改变：

$$\Delta U(r)=U(r')-U(r)$$

求$\Delta U(r)$一般采用刚体型和可变型两种假定。前者认为离子热运动引起的晶体周期位的变化是由于离子本身位移的结果。这样，

$$\begin{aligned}\Delta U(r)&=Z[U(r-R_i-u_i)-U(r-R_i)]\\&=-Zu_i\nabla U(r-R_i)\end{aligned}$$

式中，R_i和U_i为第 i 离子的平衡位置和位移量。可变型假定则认为离子移动时电子也要跟随着移动，它们之间的相对位置仍为 r，这样：

$$\Delta U(r)=Z[U(r-u_i)-U(r)]$$
$$=-Zu_i\nabla U(r)$$

式中，u_i是热振动引起的位移，它与时间 t 明 显 有 关，故 会引起电子状态改变。从(7-14)式求得单位时间内电子状态改变的几率P为：

$$P=\frac{|a_n^{(1)}(t)|^2}{t}=\frac{1}{i\hbar t}\left|\iint\Psi_k^*\Delta U(r)\ \Psi_n e^{i\omega_{kn}t}dtd\tau\right|^2$$

$$=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\int\Psi_k^*\Delta U\Psi_n d\tau\right|^2\delta(E_k-E_n) \tag{7-15}$$

在讨论晶体电阻时，(7-15)式中的电子状态波函数可以用自由电子的平面波函数去近似，即可令(7-15)式中的$\Psi_n=f_0e^{iE_nt/\hbar}\cdot e^{-i\vec{k}n\vec{r}}$代入。因而，

$$P=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\int\Delta U e^{-i(\vec{K}_n-\vec{K}_k)\cdot\vec{r}}d\tau\right|^2 \tag{7-16}$$

(7-16)式的P表示一种状态改变成另一状态的几率，所 以还应乘上后一状态的状态密度$D(E)$才真正代表跃迁几率。

$$P_r=D(E)\cdot P=\frac{4\pi mk_n}{(2\pi)^3\hbar^2}P \tag{7-17}$$

用微分散射截面$I(\theta\varphi)$表征电子状态被改变的几率会 带来更为直观的理解。$I(\theta\varphi)$意指一束粒子被散射到偏离入射 方向(θ, φ)角的那一部分粒子。$nvI(\theta\varphi)$为单位时间内进入(θ,φ)方向立体角中的粒子数，（v为粒子速度），它应等于单位时间内向(θ, φ)方向散射的粒子数。所以

$$nvI(\theta\varphi)=nP/4\pi$$

设散射位$U(r)$是球对称的，而且散射是弹性 的，即 入射粒子波长与散射粒子的波长相等，只是粒子运动方向发生改变，即

$|\vec{K}_n| = |\vec{K}_h| = |\vec{K}_0|$。代入(7-16)式并对立体角积分，求得

$$I(\theta) = \int I(\theta\varphi)\, d\Omega$$

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \left[\int_0^{r_0} \frac{\sin Kr}{Kr} \Delta U(r) r^2 dr\right]^2 \qquad (7\text{-}18)$$

式 中，$K = 2K_0 \sin\frac{\theta}{2}$。

假定散射束对入射轴x是对称的（见图7-1)则总散射截面为：

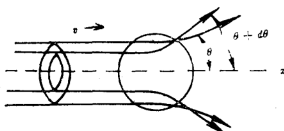


图7-1 散射截面示意图

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} I(\theta) \sin\theta d\theta$$

散射后粒子在原入射方向的速度分量为$v\cos\theta$，故粒子在入射方向的速度相对变化为$(v - v\cos\theta)/v$，因此总散射截面应修改为：

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} I(\theta)(1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta \qquad (7\text{-}19)$$

导电电子理论求出晶体的电阻率ρ：

$$\rho = m/ne^2\tau$$

式中，n为电子数，τ为电子在二次碰撞间平均自由时间。所以平均自由径$(v\tau)$的倒数等于$N\sigma$，N为单位体积中散射中心（例如点缺陷、位错……）数目。因此

$$\frac{1}{\tau} = Nv\sigma \qquad (7\text{-}20)$$

研究晶体缺陷电阻问题就在于导出散射位$\Delta U(r)$，从(7-19)式求出总散射截面σ，再由(7-20)式求出τ值，最后得出晶体的缺陷电阻ρ。

二、点缺陷电阻

晶体中的点缺陷根据其特性会从三方面影响晶体的周期场。(1) 设基体是 $+Z$ 价离子。缺陷所在处的荷电量 Z' 一般说来与基体离子的不同，故在缺陷附近形成了屏蔽场，其屏蔽电位为：

$$\Delta U_p = -\frac{(z'-z)e^2}{r}\exp(-qr)$$

式中，$q^2 = 4\pi eN(E_F)$，E_F为弗米能，$N(E_F)$为对应E_F的状态密度。(2) 因杂质原子与基体原子大小不同或因空位形成而使周围原子发生位移，或因基体原子脱离点阵位置而成为间隙原子都会形成附加位—称为变型位：

$$\Delta U_g = -\sum U_i(r)\nabla V(r)$$

式中，U_i为第 i 个缺陷引起的位移，$V(r)$ 等于缺陷的屏蔽位 ΔU_P。(3) 即使替代原子与基体原子的原子价相同，原子大小相近，例如Cu-Ag、Cu-Au固溶体，由于各自的原子位有差别，其附近的晶体周期场也会受到破坏，由此引入的附加位为：

$$\Delta U_a = U_{Sa} - U_{Ba}$$

式中，U_{Sa}和U_{Ba}分别为替代原子位和基体原子位。

将上述的散射位ΔU_p、ΔU_g和ΔU_a的具体值代入 (7-20) 式，就求出 τ 值，从而求出各类点缺陷引起的电阻$\Delta\rho$：

$$\left.\begin{aligned}
\Delta\rho_1 &= \rho_N[1-\eta(r_0)4\pi A_1/\Delta] \\
\Delta\rho_2 &= \rho_N[1+\eta(r_0)4\pi A_2/\Delta] \\
\Delta\rho_3 &= \rho_N[(Z/g-1)^2-(Z/g-1)\eta(r_0)4\pi A_3/\Delta] \\
\Delta\rho_4 &= \rho_N[(Z/g)^2-(Z/g)\eta(r_0)4\pi A_4/\Delta]
\end{aligned}\right\} \qquad (7\text{-}21)$$

$\Delta\rho_1$、$\Delta\rho_2$、$\Delta\rho_3$和$\Delta\rho_4$分别为间隙原子、空位、替代杂质（ g 价原

子）和间隙杂质（y价原子）引起的电阻。

式中 $$\rho_N=\frac{2Z^2e^2m^*N}{3\pi\hbar^2 n}\left(\ln\frac{a^2+1}{a^2}-\frac{1}{a^2+1}\right)$$

A_1、A_2……r_0和v等参量为与缺陷类型有关的量，Δ为原子体积m^*是晶体中电子的有效质量，n为电子数，N为缺陷数，Z为基体原子的价数。(7-21)式中的第二项是缺陷的变形位引起的。对空位来说$4\pi A_1/\Delta\ll 1$。故计算空位电阻可以只考虑屏蔽位引起的作用。即

$$\Delta\rho_1=\rho_N$$

三、位错电阻

位错电阻至今尚未精确计算过。主要问题在于散射位的探求较困难。Bardee[6]等曾推导出位错引起的晶体畸变和与此有关的散射位，其E为常数。

$$\left.\begin{aligned}\Delta U_D&=\frac{E}{e}\Delta(r)\\ \Delta(r)&=\frac{b}{2\pi}\,\frac{1-2v}{1-v}\,\frac{\sin\beta}{r}\end{aligned}\right\}\tag{7-22}$$

$\Delta(r)$实际上是位错在离中心(r,β)处的晶体体积变化。将(7-22)代入(7-20)式求出位错电阻：

$$\rho_D=\frac{E^2b^2m^*N}{4\pi^2ne^2}\left(\frac{1-2v}{1-v}\right)^2\tag{7-23}$$

Hansson[7]等用其他方法求出位错电阻：

$$\rho_D\cong\frac{v_FQm^*N}{ne^2}bd\tag{7-24}$$

式中，v_F是弗米面上电子速度，d是位错扩展宽度，N是位错密度。

§3　缺陷与半导体性能

硅、锗等第4族元素的共价晶体绝对零度时为绝缘体，温度升高导电率增加但比金属的小得多，称这种晶体为半导体。晶体呈现半导体性能的根本原因是填满电子的最高能带与导带之间的禁带宽度很窄，温度升高部分电子可以从满带跃迁到导带成为传导电子。晶体的半导体性能决定于禁带宽度以及参与导电的载流子（电子或空穴）数目和它的迁移率。缺陷影响禁带宽度和载流子数目及迁移率，因而对晶体的半导体性能有严重影响。

一、半导体中载流子数目和它的迁移率

晶体的能带论得出单位体积中能量在E和$E+dE$范围内电子数目为：

$$dn_e = c\sqrt{E}\,dE/[e^{(E-E_F)/kT}+1] \qquad (7\text{-}25)$$

式中，$C=\frac{4\pi(2m_-^*)^{\frac{1}{2}}}{h^3}$，$m_-^*$为导带中电子有效质量。取导带的底为能量的零点，求得导带中电子数为：

$$n_e=\int dn_e=\int_0^\infty \frac{C\sqrt{E}\,dE}{e^{(E-E_F)/kT}+1}$$

当$E-E_F\gg kT$，并注意到$\int_0^\infty e^{-\alpha x}xdx=\frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$，求得：

$$n_e=2\left(\frac{2\pi m_-^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{E_F}{kT}} \qquad (7\text{-}26)$$

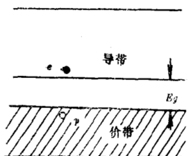


图7-2　本征半导体能阶图

因满带位于导带下面，禁带宽度为E_g（见图7-2）。当满带中有电

子在热激活下跃迁到导带，满带中出现空穴。类似方法可求出满带中空穴数目：

$$n_h = 2\left(\frac{2\pi m_+^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_F+E_g)/kT} \tag{7-27}$$

空穴数目n_h应等于跃迁到导带的电子数n_e，由此求得：

$$E_F = -\frac{1}{2}E_g + \frac{3}{4}kT\ln\frac{m_-^*}{m_+^*}$$

$$n_e = n_h = 2\left(\frac{2\pi kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} (m_-^* m_+^*)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \tag{7-28}$$

上式表明本征半导体中载流子数目(n_e和n_h)由禁带宽度 E_g决定。

载流子的迁移率μ意指单位载流子的移动速率，它与电阻ρ的关系为：

$$\mu = \frac{1}{\rho ne}$$

所以半导体晶体中载流子的迁移率与电阻率一样通过散射位的确定求出。引起载流子散射的位函数除晶格热运动引起的以外还有离子杂质、中性杂质、空位、位错等缺陷引起的。

（1）施主杂质是带正电荷的离子，受主杂质是一个带负电荷的离子，由于其带电量与基体原子不同，（设相差的电量为Z_e）杂质周围形成屏蔽位：

$$\Delta U_p = -\frac{ze^2}{r}\exp(-qr) \tag{7-29}$$

（2）中性杂质由于它与基体原子在大小上、在结合强度上有差别也会产生载流子的散射位。Erginsoy[9]假定中性杂质的散射位为：

$$\Delta U_N = \begin{cases} -U_0 & r \leqslant a_0 \\ 0 & r > a_0 \end{cases}$$

式中，a_0为位垒起作用的有效半径。

（3）原子热振动对载流子的散射作用可以处理成声子与载流子相互碰撞。设$\vec{g}_i$为第 i 声子的动量，则原子热振动的散射位为：

$$\Delta U_v = \sum u_0 \exp(\vec{g}_i \cdot r) \nabla U(r)$$

式中，u_0为常量，$U(r)$为基体原子的位函数。

空位、位错等其他缺陷的散射位函数与讨论点缺陷、位错缺陷对电阻影响中所论及的相同。

二、缺陷对半导体晶体能阶的影响

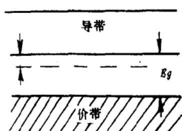
硅和锗本征半导体的晶体结构为金刚石型。每个原子与四个近邻原子共价结合。杂质原子的引入或空位的形成都改变了参与结合的共价电子数目，影响晶体的能价分布。

（1）为了改善本征半导体的性能有意掺入一些三、五族元素形成掺杂半导体。当五价原子如砷掺入后它的 5 个价电子中的 4 个与近邻 4 个基体原子组成共价键，还多个一个电子。这个电子易被激活到导带。这种多余的电子称为逾量电子，贡献逾量电子的那类掺杂原子称为施主。同样若把一个三阶原子如磷等掺入硅、锗基体中，它的三个价电子与三个近邻基体原子组成共价键。因此第 4 个近邻因形不成共价键而存在空能阶。空能阶可以吸收其他原子上的成键电子，称空能阶为空穴。这类杂质原子称为受主，贡献的空穴称为逾量空穴。可以用类氢原子的模式计算逾量电子或逾量空穴的能阶。

图7-3为掺入五价元素后价电子分布示意图。由图看出逾量电子如同氢原子的价电子。它受到的库伦位为$e/\varepsilon r$，式中 ε 是晶体介电常数。参照求解氢原子方法可以求出逾量电子能阶：

$$E_n^e = -\frac{m_-^* e^4}{2nh^2\epsilon^2} \quad (n = 1, 2 \cdots 3)$$

$n=1$，$E_1^e=-\frac{m^*e^4}{2h^2\varepsilon^2}$相当于处于基态的逾量电子脱离杂质原子的能量。也就是逾量电子跃迁到晶体导带的能量。计算得出$E_I^e \ll E_g$，因此在晶体的禁带区域内多了个能阶E_I（见图7-3的上部）。从而半导体的导电性明显增加。因参与导电的载流子主要是电子，故称这种掺杂半导体为n型半导体。



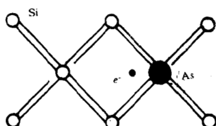


图7-3 掺五价元素的半导体能阶

如掺入的是三价原子则形成逾量空穴，空穴可以看作正电荷。贡献逾量空穴的三阶原子可以看作带负电荷的核，所以正电荷受到的库伦位仍为$e/\varepsilon r$。同理可以求出逾量空穴能阶：

$$E_n^h=-\frac{m_+^*e^4}{2nh^2\varepsilon^2}$$

$$(n=1,\ 2,\ \cdots 3)$$

$n=1$，$E_1^h=-m_+^*e^4/2h^2\varepsilon^2$，相当于满带上的电子跃迁到杂质原子能阶的能量。（见图7-4）。因为这类半导体参与导电的主要是空穴的移动故称为P型半导体。因为E_I^e或E_I^h在数值上都小于E_g，所以本征



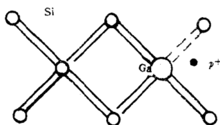


图7-4 掺三价元素的半导体能阶

半导体掺入三、五族杂质后在禁带区内形成了附加能阶。

（2）其他点缺陷如空位或除三、五族以外的别的杂质原子原则上也会形成附近能阶。因为空位等点缺陷与本征半导体原子的价电子电荷相差往往不是一个单位，故逾量电子或逾量空穴有多个，计算它他的能阶要用多体问题方法，比较繁琐。但不管怎样，定性结论是不变的，即在晶体的禁带区形成了若干附加能阶。图7-5为硅半导体中杂质原子的能阶[10]。

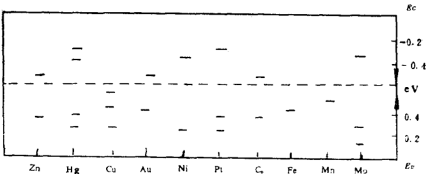


图7-5　硅晶体中杂质深能级举例

（3）位错对半导体性能影响很大，但目前只对金钢石结构的硅、锗中的位错了解得较多一点[11]。图7-6表示硅、锗晶体中平行于〈110〉方向的一个60°位错。可以看到沿着位错芯列D有许多原子只和三个最近邻原子成键，这些原子都有一个相对自由的价电子，因此它们或者通过俘获一个空穴而起受主作用，或者通过接受电

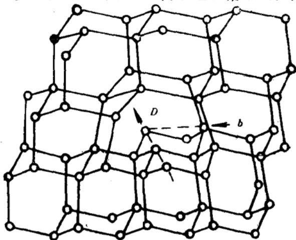


图7-6　金刚石结构中60°位错

子形成电子对键而起施主作用。位错对半导体晶体的许多性能之所以有影响就是存在这种共价键的不饱和，这种键称为悬浮键。

位错周围晶格发生畸变，附近晶体的周期场受到破坏，从(7-5)式知道禁带宽度与周期场有关，周期场被局部破坏导致禁带宽度局部变形。理论研究指出[12]，晶体体积改变 ΔV，导带底部和满带顶部的能量E_0和E_v相应地发生改变：

$$\Delta E_0 = \varepsilon_0 \frac{\Delta V}{V_0} \tag{7-30}$$

$$\Delta E_v = \varepsilon_v \frac{\Delta V}{V_0} \tag{7-31}$$

式中ε_0和ε_v是单位积体变化引起的E_0和E_v变化的度量，被称为形变位常数。所以晶体体积改变引起禁带宽度的变化为：

$$\Delta E_g = (\varepsilon_0 - \varepsilon_v) \frac{\Delta V}{V} \tag{7-32}$$

图7-7为刃型位错引起的禁带宽度变化示意图。刃型位错滑移面的上部受压，ΔV为负值，下部受拉，ΔV为正值，因此禁带宽度变化如图7-7所示是不均匀的。晶体的布里渊区是各向异性

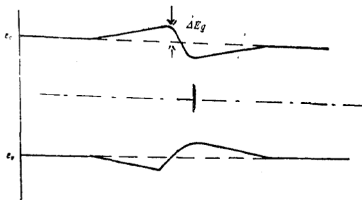


图7-7 位错附近的能阶

的，所以ε_0和ε_v等形变位常数也与晶体的方向有关，故而ΔE_g也是各向异性的。

三、缺陷对载流子数目的影响[8]

上述分析得出点缺陷使能带的禁带区出现附加能阶，位错缺陷影响禁带宽度，位错本身又会起悬浮键作用，因而缺陷必然会影响载流子数目。

（1）在本征半导体硅、锗中掺入五族元素后，半导体中有逾量电子存在，这时参与导电的是本征半导体的电子与空穴和五族元素提供的逾量电子。现在来求逾量电子的数目。设单位体积中有n_d个施主，具有电离能E_I^e，若以导带的底部为能量零点则施主能阶为$-E_I^e$。当温度为T时，施主能阶上占据的电子数为：

$$n' = n_d / [e^{-(E_I^e + E_F)/kT} + 1] \tag{7-33}$$

离开施主而激发到导带的电子数$n = n_d - n'$。n同样可用（7-26）式算出：

$$\left.\begin{aligned} n &= 2\left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{E_F/kT} \\ n &= n_d - n' = [n_d e^{-(E_I^e + E_F)/kT}] / [e^{-(E_I^e + E_F)/kT} + 1] \end{aligned}\right\} \tag{7-34}$$

温度不高时 n 很小，故$e^{-(E_I^e + E_F)/kT}] \ll 1$，这样从(7-34)式可以算出：

$$\left.\begin{aligned} E_F &= -\frac{E_I^e}{2} + \frac{kT}{2}\ln\left[\frac{n_d}{2(2\pi m_e^* kT/h^2)^{3/2}}\right] \\ n &= n_d^{\frac{1}{2}}\left[2\left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e\right]^{\frac{1}{2}} \text{-} E_I^e/2kT \end{aligned}\right\} \tag{7-35}$$

本征半导体中掺入三族原子形成逾量空穴，用类似方法可以算出空穴数目：

$$n = n_a^{\frac{1}{2}}\left[2\left(\frac{2\pi m_-^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-E_I^h/2kT} \qquad (7\text{-}36)$$

式中，n_a为单位体积中受主的数目。(7-35)和(7-36)表示的n就是因掺入三、五族杂质原子而引入的逾量电子和逾量空穴数目，如果将E_I^e和E_I^h代入表达式中就会发现逾量电子和逾量空穴数目明显超过本征半导体原有的载流子数目。

(2) 已知位错缺陷可以看作悬浮键，它起着施主或受主的作用，位错又影响禁带宽度，所以必然影响载流子的数目[11]。

设单位长度的位错段已有f部分的悬浮键俘获了电子，则体系的自由能变化为：

$$F = f(E_0 - E_F) + E_{el}(f) - TS(f) + \Delta E$$

式中，E_0为悬浮键在俘获电子前的能量，E_F为弗米能。（因为俘获电子后，能带被填满）。ΔE是电子进入位错蕊后处于激电态而增加的能量。一般$\Delta E \sim f^2$所以在$f<1$时可以忽略。E_{el}是电子被俘获后电子分布状态改变引起的静电能。$S(f)$是熵值。当体系平衡时，从$\frac{\partial F}{\partial f} = 0$得出：

$$(E_0 - E_F) + \frac{\partial E_{el}}{\partial f} - T\frac{\partial s}{\partial f} = 0 \qquad (7\text{-}37)$$

现在的问题是求出E_{el}和S。

$$S = k_B l_n W = k_B l_n \frac{1}{f!(1-f)!}$$

所以 $$T\frac{\partial S}{\partial f} = K_B T \ln\left(\frac{1-f}{f}\right)$$

设悬浮键之间的间距为A，单位长度位错所带的电量为Q，则

$$Q - \pi R^2 e(N_d - N_a) = 0$$

式中，N_d和N_a分别为施主和受主密度。R为位错线周围带电圆柱体的半径。根据电学理论求得圆柱体内外的电位$V(r)$为：

$$V(r)=\begin{cases}\dfrac{Q}{2\pi\varepsilon}\left[\ln\dfrac{R}{r}+\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{r^2}{R^2}-1\right)\right] & 当\quad r\leqslant R\\ 0 & \quad\quad r>R\end{cases}$$

这样悬浮键俘获电子后静电能E_{el}为：

$$E_{el}=A\int_{r_0}^{R}\rho(r)V(r)2\pi r dr+AQV(r_0)$$

$$=\frac{Q^2A}{4\pi\varepsilon}\left[\ln\frac{R}{r_0}-\frac{1}{2}\right] \tag{7-38}$$

设单位长度的位错段有N个悬浮键，其中n个已俘获电子，则容易导出以下关系：$f=\dfrac{n}{N}$，$f_e=\dfrac{ne}{N}=QA, R^2=Q/\pi\rho=Q/\pi e(N_d-N_a)$，又知其中$r_0=A/f$（$r_0$称为截止半径）。将上述诸关系代入(7-38)式中，求得：

$$E_{el}=e^2f^2\Big/\left[4\pi\varepsilon A\left(\frac{3}{2}\ln\frac{f}{fc}-\frac{1}{2}\right)\right] \tag{7-39}$$

$$\frac{dE_{el}}{df}=e^2f\Big/\left[2\pi\varepsilon A\left(\frac{3}{2}\ln\frac{f}{fc}+0.25\right)\right]$$

式中，$f_c=A[\pi(N_d-N_a)]^{\frac{1}{3}}$。从(7-37)式求得$f$方程为：

$$(E_0-E_f)+e^2f\Big/\left[2\pi\varepsilon A\left(\frac{3}{2}\frac{f}{fc}+0.25\right)\right]$$

$$-k_BT\ln\left(\frac{1-f}{f}\right)=0 \tag{7-40}$$

由此求出f值。位错俘获电子使载流子数目减少，所以半导体中实际载流子数目减少Δn为：

$$\Delta n = \frac{D}{A} f$$

式中，D为位错密度。

§4 离子晶体中缺陷

离子晶体由正负离子组成。氯化钠结构和氯化铯结构是二种常见的离子晶体结构。卤化碱离子晶体在光谱的整个可见光波段中是透明的，但有好几种方法会使晶体赋色。其原因要从光的发射和吸收谈起。

一、光的发射和吸收[13]

晶体中原子与光的相互作用实质上是电子与电磁场的互作用。电子在电磁场作用下，呈现自发发射、受激发射和吸收三种现象。爱因斯坦导出了三者之间关系：

$$B_{nm} = B_{mn}$$

$$A_{nm} = \frac{\hbar\omega^2_{nm}}{c^2\pi^2} B_{nm}$$

式中，A_{nm}是自发发射系数，表征单位时间内电子从φ_n态自发跃迁到φ_m态的几率。B_{nm}是受激发射系数。$B_{nm}I(\omega)$表征单位时间内电子从φ_n态过渡到φ_m态并发射出能量为$h\omega$光子的几率。$B_{mn}I(\omega)$表征单位时间内电子由φ_m态吸收能量为$h\omega$的光子跃迁到φ_n态的几率。

光的电场和磁场强度相等，但磁场对电子的作用是电场的$\frac{v}{c}$倍。v是原子的电子速度～10^8cm/s，c是光速～3×10^{10}cm/s。所以讨论光对电子作用只需考虑电场的作用。光波电场$\vec{E}$和电子在电场中的位能V分别为：

$$\vec{E}(t)=\vec{E}_0e^{\pm i\omega t}$$

$$V=e\vec{E}\cdot\vec{r}=-\vec{E}\cdot(-e\vec{r})=-\vec{E}\cdot\vec{D} \tag{7-41}$$

通常光对电子的作用是不强的，故位能V可看作(7-6)式中的微扰项$\overline{W}(t)$。将(7-41)式代入求得：

$$a_n^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int\varphi_k^*(-\vec{E}_0\cdot\vec{D})\varphi_n e^{\pm i\omega t}\cdot e^{i\omega_{kn}t}d\tau dt$$

$$=\frac{1}{\hbar}F_{nk}\frac{e^{i(\omega_{kn}\pm\omega)t}-1}{\omega_{kn}\pm\omega}$$

$$|a_a^{(1)}(t)|^2=\frac{4|F_{nk}|^2\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{kn}\pm\omega)t}{\hbar^2(\omega_{kn}\pm\omega)^2} \tag{7-42}$$

式中，$F_{nk}=\int\varphi_k^*(-\vec{E}_0\cdot\overline{D})\varphi_n d\tau$，相对于一定传播方向的偏振光，$D$的取向是任意的，将(7-42)式代入(7-15)式求得：

$$B_{mn}I(\omega)=\overline{P}_{mn}=\frac{\pi}{2\hbar^2}|E_0|^2|D_{mn}|^2\overline{\cos^2\theta}$$

因为 $$I(\omega)=\frac{1}{8\pi}\overline{(E^2+H^2)}=\frac{1}{4\pi}\overline{E^2}=\frac{E_0^{\ 2}}{8\pi}$$

$\therefore$ $$B_{mn}=\frac{4\pi^2}{3\hbar^2}|D_{mn}|^2=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}|r_{mn}|^2 \tag{7-43}$$

$$r_{mn}=\int\varphi_m^* r\varphi_n d\tau$$

从(7-43)式见到光的吸收和发射决定于偶极矩阵元r_{mn}是否等于零，这就是所谓选择定则。例如在有心力场中运动的电子的波函数为：

$$\begin{aligned}\varphi_k&=R_{n'l'}(r)y_{l'm'}(\theta\varphi)\\ \varphi_n&=R_{nl}(r)y_{lm}(\theta\varphi)\end{aligned} \tag{7-44}$$

将(7-44)代入(7-43)式中，不难证明只有当$l'=l\pm1$，$m'=m$或$m'=m\pm1$时，偶极矩矩阵元才不等于零。所以原子中电子跃迁的选择定则是：

$$l'=l\pm1 \qquad m'=m或m'=m\pm1$$

用选择定则可以阐明晶体中光的吸收和发射，是晶体光谱学的基础。

二、离子晶体中的点缺陷[10]

与金属晶体一样点缺陷同样可以分为肖克莱型（正离子空位，负离子空位和正负离子空位对），和弗兰克型（正(负)离子空位＋正(负)离子间隙）。但是离子晶体的点缺陷可以带着电子（图7-8中以·表示）或空穴（以∘表示），构成空位—电子对，空位—空穴对等。

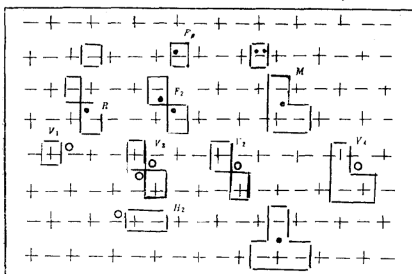


图7-8 各类色心机构(□空位，·电子，∘空穴)

晶体中的化学杂质，晶体受到x射线、γ射线或中子、电子轰击，晶体放在卤金属蒸汽中加热后快冷等等都会使晶体拥有过

量的金属离子。这种点缺陷会使透明无色的晶体赋上各种颜色—称为色心。色心有多种

*F*心——负离子空位束缚一个电子

*F'*心——负离子空位束缚二个电子

*V*心——正离子空位束缚空穴

*R*心——由一个*F*心和一个负离子空位构成

*M*心——由一个*F*心和一个正负离子空位对构成。图 7-8为离子晶体的点缺陷。

根据束缚空穴数目的不同，*V*心可以分为V_1、V_2、V_3…色心。同样根据束缚电子数目的不同，*R*心也可以分为 R_1、R_2、R_3…色心。

三、色心的形成[14]

例如卤化碱晶体(NaCl)放在钠蒸汽中加热后快冷，使晶体中钠原子多于氯原子形成氯离子空位，但为使晶体保持电中性，氯离子空位将俘获电子而形成负离子空位—电子对缺陷，即*F* 心。使得原来透明的NaCl晶体赋上黄色。卤化碱晶体的禁带宽度一般是9-10eV，可见光不能被吸收故晶体透明。但晶体内含缺陷后，禁带区引入了附加能阶，引起附加吸收使晶体赋色。为了说明色心的形成，以*F* 心为例。*F* 心是负离子空位束缚一个电子的缺陷。束缚的电子可当作处于无限深的三维势阱中的粒子处理。*F* 心的电子应满足以下薛定格方程：

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)=0 \qquad (7\text{-}45)$$

$$U=\begin{cases}0 & \\ & \text{当}x,\ y,\ z\text{在}(0,a)\text{区间内大于}a\text{而小于零范围} \\ \infty & \end{cases}$$

求解(7-45)式得出：

$$\Psi_{lmn} = \sqrt{\frac{8}{a}}\sin\frac{l\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{a}\sin\frac{n\pi z}{a} \tag{7-46}$$

$$E_{lmn} = \frac{\pi^2\hbar^2(l^2+m^2+n^2)}{2ma^2}$$

当$l=m=n=1$时$E_{111}=3\pi^2\hbar^2/2ma^2$，这是$F$心的最低本征态能量。第一激发态是三重简并的，相应的三个本征函数为Ψ_{211}、Ψ_{121}和Ψ_{112}，其本征能量为$E_{121}=3\pi^2\hbar^2/ma^2$。所以$F$心第一允许跃迁($1S \to 2p$)的能量$E_F=\frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(1-\frac{1}{2}\right)$，附加吸收最低频率$\nu_1$为$\frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}$。这样可以定性说明$F$心的赋色问题。

四、位错应力场与晶体双折射[15]

晶体的双折射现象首先从方解后晶体上观察到。当入射光垂直投入到方解石的菱面上（入射角为零），折射光有二束，其中一束遵守折射定律称为寻常光（又称o光），另一束偏离入射光路（折射角不为零）称为非常光（又称e光）。o光和e光都是偏振光，而且振动方向相互垂直。立方晶系如NaCl等晶体不具有双折射性质，但若晶内存在内应力，则晶体呈现双折射特性。位错影响晶体光学性能的原因之一就是通过双折射现象。反之可以利用双折射现象检验晶体中是否存在位错缺陷。人们就是用此方法选取合适的激光晶体棒。

（1）双折射现象。光波是电磁波，要用$\vec{E}$（电场）、$\vec{D}$(电位移）和$\vec{H}$（磁场）描述，它们之间满足麦克斯威方程：

$$\left.\begin{aligned} \nabla\times\vec{H} &= \frac{1}{C}\frac{d\vec{D}}{dt} \qquad \nabla\cdot D=0 \\ \nabla\times\vec{E} &= -\frac{1}{C}\frac{d\vec{H}}{dt} \qquad \nabla\cdot\vec{H}=0 \end{aligned}\right\} \tag{7-47}$$

若令$\vec{K}$为波矢量，$\vec{m}$为折射矢量，n为介质折射率，$\vec{K}_0$为波的传播方向。则 $\vec{K}=\frac{\omega}{v}\vec{k}_0$，$\vec{m}=\frac{c}{\omega}\vec{k}$。单色平面波可写为：

$$\vec{E}=\vec{E}_0\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\vec{m}\cdot\vec{r}}{c}\right)\right]$$

$$\vec{H}=\vec{H}_0\,\mathrm{exd}\left[i\omega\left(t-\frac{\vec{m}\cdot\vec{r}}{c}\right)\right]$$

对各向同性介质来说：

$$\vec{D}=\varepsilon\vec{E}$$

ε为晶体的介电常数。将$\vec{E}$和$\vec{H}$代入(7-47)式中可以求得：

$$\begin{aligned}&\vec{H}=\vec{m}\times\vec{E}\\&n^2\vec{E}=-\vec{m}\times\vec{H}\\&n^2=\varepsilon\end{aligned}\qquad(7\text{-}48)$$

对各向异性介质来说，晶体介电常数ε是二级张量$[\varepsilon_{ij}]$，这样：

$$D_i=\varepsilon_{ij}E_j\,(i,\ j=1,\ 2,\ 3)$$

由于$\vec{D}$和$\vec{E}$不再同方向，(7-48)式改写为：

$$\left.\begin{aligned}&\vec{H}\times\vec{m}=\vec{D}\\&\vec{E}\times\vec{m}=-\vec{H}\end{aligned}\right.\qquad(7\text{-}49)$$

从上式消去$\vec{H}$，求得$\vec{D}=\vec{m}\times\vec{E}\times\vec{m}$。　　(7-50)

若选电介质张量的主轴为坐标轴则：

$$D_1=\varepsilon_1E_1\qquad D_2=\varepsilon_2E_2\qquad D_3=\varepsilon_3E_3$$

$$\varepsilon_1=n_1^2\qquad \varepsilon_2=n_2^2\qquad \varepsilon_3=n_3^2$$

将上述规定代入(7-50)式中，得出：

$$n^2E_i=n^2[E_i-K_i(\vec{E}\cdot\vec{K})]\qquad i=1,\ 2,\ 3$$

为求得$\vec{E}$的非零解，要求系数行列式等于零。

$$\begin{vmatrix} n_1^2-n^2(1-k_1^2) & n^2k_1k_2 & n^2k_1k_3 \\ n^2k_2k_1 & n_2^2-n^2(1-k_2^2) & n^2k_2k_3 \\ n^2k_3k_1 & n^2k_3k_2 & n_3^2-n^2(1-k_3^2) \end{vmatrix}=0 \tag{7-51}$$

展开此式得到：

$$n^4(n_1^2k_1^2+n_2^2k_2^2+n_3^2k_3^2)-n^2[n_2^2n_3^2(k_2^2+k_3^2)+n_3^2n_1^2(k_3^2+k_1^2) + n_1^2n_2^2(k_1^2+k_2^2)]+n_1^2n_2^2n_3^2=0 \tag{7-52}$$

这是一个n^2的二次方程。一般说来若波的传播方向$\vec{K}_0$已知，则可由这个方程求出n^2的二个不相等实根$(n')^2$和$(n'')^2$，这表明晶体具有二个折射率n'和n''。晶体呈现双折射性能。对高级晶族（立方晶系）晶体，由于$\varepsilon_1=\varepsilon_2=\varepsilon_3$，即$n_1=n_2=n_3$。根据（7-52）式，并注意到$K_1^2+K_2^2+K_3^2=1$，可得：

$$(n^2-n_0^2)=0$$

即得到两个相等的实根$n'=n''=n_0$，说明立方晶系是光学各向同性的介质，不产生双折射现象。

（2）若晶体中存在位错，则位错应力场将影响晶体的介电常数。设晶体中有一oz方向的螺位错（见图7-9）。则晶体受到对称于oz轴的应力场作用。若晶体是立方晶系，介电常数各向同性，即$\varepsilon_1=\varepsilon_2$

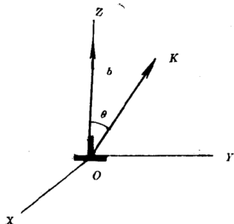


图7-9　位错对晶体介电常数方向性影响

$=\varepsilon_3$，在位错应力场作用下，介电常数不再各向同性而改为$\varepsilon_1=\varepsilon_2\neq\varepsilon_3$。设$n_1=n_2=n_0$而$n_3=n_e$。由于应力场是$oz$轴对称的，主轴$x$和$y$可以任选。选光传播的方向$\vec{K}$在$yz$平面内，与$oz$轴的夹角为$\theta$，即

$$K(K_1\ K_2\ K_3)=K(0\ \ \sin\theta\ \cos\theta)$$

将K_1、K_2、K_3值代入(7-52)式得出：

$$(n^2-n_0^2)[n^2(n_0^2\sin^2\theta+n_e^2\cos^2\theta)-n_0^2n_e^2]=0$$

由此解出两个不相等的实根。

$$(n')^2=n_0^2 \qquad (n'')^2=\frac{n_0^2n_e^2}{n_0^2\sin^2\theta+n_e^2\cos^2\theta} \qquad (7\text{-}53)$$

这样立方晶体成为有两种折射率的晶体。一种折射率不随K方向而变，($n'=n_0$)，另一种则随K方向而变，$\theta=0°$ $n''=n_0$而$\theta=90°$，$n''=n_e$。上述讨论阐明了位错的存在会使各向同性的晶体具有双折射特性。

(3) 利用上述性质可以检验晶体的完整性。

将晶体放在相互正交的二个偏光镜之间，入射光经过第一个偏光镜（称起偏镜）后成为线偏振光。如果晶体内有位错，晶体成为双折射晶体，折射率分别为n'和n''（$n'>n''$）。入射到晶体的一支偏振光分为两支光波，传播速度为v'和v''（$v''>v'$）。二支光通过厚度为d的晶体后虽以相同速度v_0在空气中传播，但它们之间存在光程差Δ和相差Γ。

$$\Delta=v_0d\left(\frac{1}{v'}-\frac{1}{v''}\right)=d(n'-n'')$$

$$\Gamma=\frac{2\pi}{\lambda}\Delta=\frac{2\pi}{\lambda}d(n'-n'')$$

将这二支光波再通过第二个偏光镜（检偏镜）汇合到同一平面

上，这二支光波产生干涉。图7-10为干涉过程的示意图。设图面

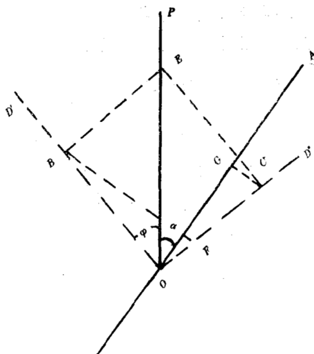


图7-10　双折射光束干涉形成过程

与晶片端面平行。D'和D''代表晶体中传播的光的两个相互垂直的振动方向。又设OP和OA表示起偏镜和检偏镜的偏振轴方向。设OP与D'和OA之间夹角分别为ϕ和α。投射在晶片上的光振辐用平行于OP的$O\vec{E}$矢量表示，则入射晶体后在D'和D''方向的分量OB和OC分别为：

$$OB = OE\cos\phi \qquad OC = OE\sin\phi$$

从晶体出来的光波，由于检偏镜只允许平行OA的分量通过，因此通过检偏镜后两支光的振幅OF和OG分别为：

$$OF = OE\cos\phi\cos(\phi+\alpha) \quad OG = OE\sin\phi\sin(\phi+\alpha)$$

可以证明在同一平面内的二支位相差为Γ而光强分别为I_1和I_2的

单色偏振光相干后的强度为：

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos\Gamma$$

将有关值代入求得通过检偏镜的干涉光强度为：

$$I = OE^2\left[\cos^2\alpha - \sin 2\phi \sin 2(\phi+\alpha)\sin^2\frac{\Gamma}{2}\right]$$

设起偏镜与检偏镜正交（$\alpha = 90°$）则：

$$I = OE^2\left[\sin^2 2\phi \sin^2\frac{\Gamma}{2}\right]$$

所以入射光与干涉光的强度比为

$$\tau = I/OE^2 = \sin^2 2\phi \sin^2\frac{\Gamma}{2} \qquad (7\text{-}54)$$

式中，$\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda}d(n' - n'')$而$(n' - n'') = C_0(e'_{11} - e'_{22})$。其中$e'_{11}$和$e'_{22}$是二个主应变，$c_0$是平均光应变系数，这样通过对$\tau$的测定可以求出位错应力场。

§5 缺陷与磁学性能

一、晶体磁性概述[8]

量子力学导出原子磁矩μ_a^J为

$$\mu_a^J = gJ\mu_B \qquad g = 1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2}$$

式中，g称为劈裂因子。$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2mc}$称为波尔磁子。$J$、$S$、$L$分别为原子的总角动量量子数，总自旋量子数和总轨道量子数。其数值根据洪德规则求出。

物质的克分子磁化强度$M = \sum_{i=1}^{N}\mu_{a\,i}^J$是把各个原子磁矩向量相

加。克分子磁化率定义为$\chi = M/H$（H是磁场强度）。所以根据物质的原子（或离子）磁矩可以判定物质磁性。原子磁矩为零的材料是抗磁性的，原子磁矩不为零的材料可以是顺磁性或铁磁性物质。铁磁性物质要满足三个条件：(1) 原子中存在电子不满的壳层，晶体的能带中就会有许多空能阶，使自旋平行的电子尽可能多。(2) 那种电子不满壳层的状态密度足够高，使由于电子自旋平行增加的能量小于交换作用降低的能量。(3) 晶体的原子间距要适当，间距太大则交换作用太弱不足以克服热运动导致的无序化作用，间距太小则泡利斥力起主要作用。

上述三条来源于对交换能的要求。量子力学分析得出物质为铁磁性的必要条件是交换能A小于零。即

$$A = -2J\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 < 0$$

式中，J为电子(1)和电子(2)的交换积分。设$\Psi(1)$和$\Psi(2)$的电子(1)和电子(2)的状态函数，$\omega(r)$为与电子间互作用有关是位函数算符，则J为：

$$J = \int \Psi^*(1)\omega(r)\Psi(2)d\tau$$

满足上述要求的只有过渡族元素的一部分，所以只有这些元素或其部分化合物是铁磁性材料。

物质的铁磁性要经过外磁场的磁化作用表现出来。能量极小原理要求磁性物质是由磁矩取向各异的磁畴构成。外磁场的作

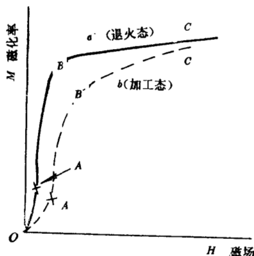


图7-11 铁磁材料的磁化曲线

用是将磁矩择尤取向。图7-11为铁磁物质的磁化曲线。曲线可分

为三段。OA—畴壁可逆移动，AB—畴壁不可逆移动，BC—畴壁传动。

二、位错对铁磁性的影响[16]

一般说来加工硬化降低磁场H的磁化作用。在图7-11中的虚线为加工硬化材料的磁化曲线，比较后得出：

（1）起始段(OA'段）的斜率$\frac{dM}{dH}$小于OA段的斜率，这表明磁畴不可逆移动开始的磁场H_A(A点的磁场强度)升高，即 $H_{A'}>H_A$。

（2）加工使物质的饱和磁化强度降低。

$$\Delta M = M_c - M_{c'} = \frac{a}{H} + \frac{b}{H^2}$$

式中，a、b为常数。

磁化曲线上的A点标志磁畴壁在磁场作用下不可逆移动开始，即磁畴壁开始脱离钉扎物而作不可逆移动。加工后位错增多可以看作钉扎点增加。加工硬化对H_A的影响可以参照受钉扎的位错线的弯曲问题处理。设T为畴壁的表面张力，M_s为材料的饱和磁矩，μ_0为磁导率。则磁场H作用在单位面积畴壁上的力$F=\mu_0 M_s H$。在F作用下畴壁弯曲。设被钉扎的畴壁段长度平均为S，当畴壁的弯曲曲率半径$R=\frac{S}{2}$时，畴壁开始不可逆移动。设此时的磁场强度为H_A，则H_A为：

$$\mu_0 M_s H_A = T / \frac{S}{2}$$

加工后位错增多，被钉扎的畴壁段长度S减小，因而H_A增大。由此说明了加工后$H_{A'}>H_A$。

单位磁畴壁段脱钉后扫过的面积A为：

$$A = \frac{R^2(\theta - \sin\theta)}{2S} \doteq \frac{R^2}{2S}\left[\theta - \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!}\right)\right]$$

$$\doteq S^2/12R$$

设畴壁之间平均间距为d，畴壁周长为L，则 $nLd = 1$，其中n为单位体积中畴的数目。畴壁脱钉后磁化强度的增加值：

$$\Delta M_1 = AM_S L^2/L^2 d = M_S S^2/12Rd \qquad (7\text{-}55)$$

式中，AL^2为一个周长为L的畴壁扫过的面积，L^2d为磁畴体积。AL^2/L^2d为被吞并的磁畴数目。位错增多意指S减小，所以ΔM_1降低。这表明磁性材料加工以后，它的磁化过程减慢，磁化曲线右移（图7-11的虚线）。

位错对磁化第三阶段（BC段）的影响，Brown[17]作了说明。设有一条沿oz轴的刃型位错段，其柏氏矢量b沿ox轴，外磁场$\vec{H}$沿oy方向。见（图7-12）。位错应力场的σ_{xy}分量会使磁化强度$\vec{M}$在xoy面内作轻微转动。$\alpha = \cos\theta$为$\vec{M}$在x轴的方向余弦。体系的能量由三部分组成：

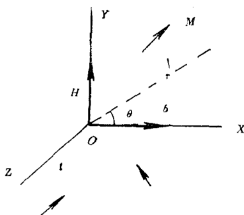


图7-12　刃型位错的减小磁化效应

（1）外磁场的作用能W_H

$$W_H = -\int HM_s \sin\theta d\tau \doteq \frac{1}{2} HM_s \int \alpha^2 d\tau + \text{const}$$

$$= \frac{a^3}{2} HM_s \int_0^1 \alpha^2 dy + \text{const}$$

（2）各向异性能W_a

$$W_a = \int g\alpha dy + \text{const.} \quad g = 3\lambda\sigma_{xy}$$

（3）原子之间互作用能W_c

$$W_c = \frac{1}{2}\tau\int\cos\phi d\tau \doteq \frac{1}{2}\tau\int(1-\frac{1}{2}\phi^2)d\tau$$

式中，λ为磁致伸缩系数。J为交换积分。ϕ 为二个原子磁矩的夹角，$\phi = a^{-1}\dfrac{d\alpha}{dy}$。

从体系平衡总能量极小$d(W_H+W_a+W_c)=0$ 的条件求得以下方程，其中$c=\dfrac{J}{2a}$。

$$C\nabla^2\alpha - HM_S\alpha = g \qquad (7\text{-}56)$$

因为σ_{xy}随 r 的变化比 J 的缓慢，故当 r 很大时 $C\nabla^2\alpha$ 可以忽略，这样：

$$\alpha = -\frac{g}{HM_s} = -\frac{3\lambda}{M_sH}\sigma_{xy} \qquad (7\text{-}57)$$

但是当$C\nabla^2\alpha > M_SH\alpha$时，忽略(7-56)式中的第二项后

$$\nabla^2_\alpha = \frac{g}{c} = \frac{3\lambda}{c}\sigma_{xy} \qquad (7\text{-}58)$$

所以(7-57)式适用的范围是$r>r_c$。从$C\nabla^2\alpha = M_SH\alpha$ 的条件可以求出$r_c \approx 2\sqrt{\dfrac{c}{HM_S}}$，当$r<r_c$，从(7-57)式求得 $\alpha\approx\dfrac{3\lambda}{C}F(r)$。其中$F(r)$是与$\sigma_{xy}$有关的函数。对于孤单的刃位错，在离它$(r,\theta)$地方的 $\sigma_{xy}=\dfrac{\mu b}{2\pi r}f(\theta)$。又知当$r\to0$要求$\alpha\to0$（$\bar{M}$趋向与$\bar{H}$平行）。因此在$r<r_c$范围内 α 是很小的，位错对$\bar{M}$的影响可以不计。所以只要计算r_c到 l 范围内位错的作用即可。这里 l 是位错线平均间距（$\rho l^2=1$，ρ为位错面密度）。

因位错作用而引起饱和磁矩的改变ΔM为:

$$\Delta M = M_s[1-\overline{\sin\theta}] \cong \frac{1}{2} M_s \overline{\alpha^2} \tag{7-59}$$

将(7-57)式代入(7-59)式，求得

$$\Delta M = \frac{1}{2} M_s \rho \int_{r_c}^{l} \frac{9\lambda^2}{M_s^2 H^2} \left(\frac{\mu b}{2\pi r}\right)^2 2\pi r dr$$

$$= \left[\frac{9\mu^2 b^2 \lambda^2}{4\pi M_s} \ln \frac{l}{r_c}\right] \frac{\rho}{H^2} \tag{7-60}$$

若位错是间隔为d的位错偶极矩，则它对饱和磁矩的影响为

$$\Delta M = \frac{9\mu b^2 d^2 \lambda^2}{32\pi c} \frac{\rho}{H} \tag{7-61}$$

由此可以说明材料被加工后，饱和磁矩减少的规律为:

$$\Delta M = \frac{a}{H} + \frac{b}{H^2}$$

参 考 文 献

1. 郭敦仁，1978 量子力学初步 人民教育出版社 北京
2. 程开甲，1959 固体物理学 人民教育出版社 北京
3. D.L.Dexter,Phys.Rev. 1952 87 768
4. J.Bardee et al; Phys.Rev.1950 80 72
5. W.A.Harrison,J.Phys,Chem.Sol 1958 5 44
6. 苟清泉 1978 固体物理简明教程 人民教育出版社 北京
7. 陈金富 1986 固体物理学 高等教育出版社 北京
8. R.Bullough Phys.Rev.1958 110 626
9. 蒋民华1982 晶体物理 山东科技出版社 济南

10.J.Friedel（王煜译），1984 位错，科学出版社 北京
11.B.Hendenso（范印哲译）1983，晶体缺陷，高等教育出版社，北京
12.W.F.Brown，Phys.Rev.1941.60 139

习题与思考题

1. 固溶体的导电率是否一定比基体的低，为什么？试论述以下建议—鉴于银的导电率比铝高，可在铝导线中固溶若干银来改善导电性—是否可行。
2. 推导出固体材料的导电率σ与载流子数目n的关系：$\sigma = ne^2\tau/m$。并说明如何根据导电率与温度关系判断材料是导体还是半导体。
3. 将一个F心作为在电介质常数$\epsilon = n^2$的介质中一个质量为m的电子在点电荷e的场中运动来处理，试计算NaCl($n^2 = 2.25$)中F心的$1S-2P$态的能量差，并算出吸收线的波长。